
Simulation reaktiver Mehrphasenströmungen mit einer Momentenmethode und tabellierter Chemie

Simulation of reactive multiphase flows with a method of moments using tabulated chemistry

Zur Erlangung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation von Benjamin Cornelius Synek aus Frankfurt a.M.
Oktober 2017 — Darmstadt — D 17



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT



Simulation reaktiver Mehrphasenströmungen mit einer Momentenmethode und tabellierter Chemie
Simulation of reactive multiphase flows with a method of moments using tabulated chemistry

Genehmigte Dissertation von Benjamin Cornelius Synek aus Frankfurt a.M.

1. Gutachten: Prof. Dr. rer. nat. Amsini Sadiki
2. Gutachten: Prof. Dr. Jens Lang
3. Gutachten: Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka

Tag der Einreichung: 24.10.2017

Tag der Prüfung: 08.12.2017

Darmstadt — D 17

Bitte zitieren Sie dieses Dokument als:

URN: urn:nbn:de:tuda-tuprints-76086

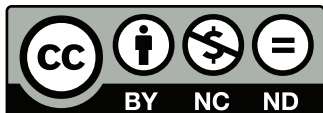
URL: <http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/7608>

Dieses Dokument wird bereitgestellt von tuprints,

E-Publishing-Service der TU Darmstadt

<http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de>

tuprints@ulb.tu-darmstadt.de



Die Veröffentlichung steht unter folgender Creative Commons Lizenz:

Namensnennung – Keine kommerzielle Nutzung – Keine Bearbeitung 4.0 International

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Erklärung zur Dissertation gemäß § 22 Abs. 7 APB der TU Darmstadt

Hiermit versichere ich, die vorliegende Dissertation ohne Hilfe Dritter nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Alle Stellen, die aus Quellen entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

In der abgegebenen Thesis stimmen die schriftliche und elektronische Fassung überein.

Darmstadt, den 28. Juli 2018

(Benjamin Synek)

*Zwei Dinge sind zu unserer Arbeit nötig:
Unermüdliche Ausdauer und die Bereitschaft,
etwas, in das man viel Zeit und Arbeit gesteckt hat,
wieder wegzuwerfen.*

Albert Einstein (1879-1955)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	3
1.2	Stand der Forschung	6
1.3	Zielsetzung der Arbeit	9
1.4	Gliederung der Arbeit	9
2	Grundlagen der Fluid-Modellierung	11
2.1	Modellierung einphasiger Fluide	11
2.1.1	Erhaltungsgleichung der Masse	11
2.1.2	Erhaltungsgleichung des Impulses	12
2.1.3	Erhaltungsgleichung der Enthalpie	13
2.1.4	Transportgleichung eines Skalars	14
2.1.5	Modellierung der Turbulenz	15
2.2	Modellierung mehrphasiger Fluide	22
2.2.1	Klassifizierung mehrphasiger Fluide	23
2.2.2	Modellierungsansätze	23
2.2.3	Mittelungsmethoden	25
2.2.4	Erhaltungs- und Transportgleichungen	26
2.2.5	Modellierung des Impulsaustauschs	28
2.2.6	Modellierung der Turbulenz in mehrphasigen Systemen	29
3	Grundlagen quadraturbasierter Momentenmethoden	33
3.1	Direct Quadrature Method of Moments	38
3.2	Direct Quadrature based Sectional Method of Moments	40
3.2.1	Splitting der Operatoren	42
3.2.2	Allgemeine Lösungsstrategien	44
3.2.3	Transport im physikalischen Raum	48
3.2.4	Transport im phasenbasierten Raum	51
4	Grundlagen der Verbrennungsmodellierung	70
4.1	Reaktionskinetik	71
4.2	Verbrennungsregime	73
4.2.1	Nicht-vorgemischte Verbrennung	78
4.2.2	Vorgemischte Verbrennung	80
4.2.3	Sprayverbrennung	82
4.3	Verbrennungsmodellierung	84
4.3.1	<i>Eddy-Break-Up-Modell</i>	86
4.3.2	<i>Flamelet-Generated-Manifold-Modell</i>	87
4.4	Neuer Ansatz zur Modellierung reaktiver Sprays	92
4.4.1	Dynamische Subiteration	93
4.4.2	Angepasster Momentenvektor	94

5	Numerische Umsetzung	98
5.1	Finite-Volumen-Diskretisierung	98
5.1.1	Diskretisierungsfehler	101
5.1.2	Diskretisierung des konvektiven Terms	102
5.1.3	Berechnung der Gradienten	104
5.1.4	Diskretisierung des diffusiven Terms	104
5.1.5	Diskretisierung des transienten Terms	105
5.2	Lösungsverfahren	106
5.3	Numerisches Gesamtverfahren	108
5.3.1	Erhaltung der Masse	108
5.3.2	Druckkorrekturverfahren	109
5.3.3	<i>Operator-splitting</i> -Verfahren	110
6	Verifizierung und Validierung	113
6.1	Experimenteller Aufbau	113
6.2	Numerischer Aufbau	116
6.3	Simulation	120
6.4	Schlussfolgerung und Bewertung	120
7	Zusammenfassung und Ausblick	136
7.1	Zusammenfassung	136
7.2	Ausblick	138

Abbildungsverzeichnis

1.1	Prognose des Weltenergieverbrauchs	2
1.2	Prognose des Bedarfs an flüssigen Brennstoffen	3
2.1	Energiespektrum einer turbulenten Strömung	16
2.2	Aufgelöstes Energiespektrum einer DNS	18
2.3	Aufgelöstes Energiespektrum einer RANS	19
2.4	Aufgelöstes Energiespektrum einer LES	20
2.5	Klassifizierung der Interaktion zwischen Tropfen und Turbulenz	30
3.1	Schematische Darstellung eines Sprays	35
3.2	Kontinuierliche und diskrete Verteilungsfunktion	36
3.3	Ansätze zur Simulation von Mehrphasenströmungen	37
3.4	Schematische Darstellung der DQMoM	40
3.5	Schematische Darstellung der DQbSMoM	42
3.6	Schematische Darstellung des konventionellen Massentransferprozesses	51
3.7	Schematische Darstellung des Massentransferprozesses mit dem EMSM-Algorithmus	53
4.1	Darstellung der chemisch gebundenen Aktivierungsenergie	73
4.2	Diagramm zur Klassifizierung von Verbrennungszuständen nach Borghi und Peters	75
4.3	Exemplarischer Verlauf der turbulenten Flammengeschwindigkeit	78
4.4	Nicht-vorgemischte, laminare Gegenstromflamme	79
4.5	Vorgemischte, laminare Flachflamme	81
4.6	Vergleich der turbulenten und laminaren Flammenfront	81
4.7	Klassifizierung und Erscheinungsformen der Sprayverbrennung nach [15]	84
4.8	Erscheinungsformen der Sprayverbrennung nach [104]	85
4.9	Vergleich der Zeitskalen und Detaillierungsgrad der Verbrennungsmodellierung	86
4.10	Erscheinungsformen der β -Funktion	92
4.11	Vergleich der Sauterdurchmesser D_{32} im Rahmen der EMSM-Methode	93
5.1	Notation der Kontrollvolumen	99
5.2	Korrektur der Interpolation bei verzerrten Kontrollvolumen	104
6.1	Experimenteller Aufbau des Sydney-Brenners und numerisches Rechengitter	114
6.2	Klassifizierung und Flammenlängen der reaktiven Konfigurationen	117
6.3	Radiale Geschwindigkeitsprofile der Konfiguration AcF2	117
6.4	Vergleich von T_{excess} für eine vorgemischte und eine nicht-vorgemischte Tabellierung	119
6.5	Radiale Profile des mittleren Durchmessers D_{10}	121
6.6	Radiale Profile des mittleren Durchmessers D_{20}	122
6.7	Radiale Profile des mittleren Durchmessers D_{30}	123
6.8	Radiale Profile des Sauterdurchmessers D_{32}	124
6.9	Radiale Profile der mittleren axialen Geschwindigkeit U_{mean}	125
6.10	Radiale Profile der mittleren radialen Geschwindigkeit V_{mean}	126
6.11	Radiale Profile der Tropfenkonzentration	127
6.12	Radiale Profile des Volumenstroms	128
6.13	Radiale Profile der Temperatur T_{excess}	129

6.14 Radiale Profile des korrigierten mittleren Durchmessers D_{10}	130
6.15 Radiale Profile des korrigierten mittleren Durchmessers D_{20}	131
6.16 Radiale Profile des korrigierten mittleren Durchmessers D_{30}	132
6.17 Radiale Profile des korrigierten Sauterdurchmessers D_{32}	133
6.18 Darstellung der Temperatur T_{excess} mit Benetzungseffekten und Strahlungskorrektur	135

Tabellenverzeichnis

2.1	Standardparameter des k - ε -Modells	22
2.2	Klassifizierung einer Zweiphasenströmung	23
2.3	Modellierungsmethoden mehrphasiger Fluide	24
3.1	Charakteristische Tropfendurchmesser	37
3.2	Korrekturterme der Massen- und Wärmetransfermechanismen	58
6.1	Charakteristische Größen der Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3	115
6.2	Charakteristische Stoffdaten von Aceton	120

Nomenklatur

Lateinische Großbuchstaben		Einheit
A	Allgemeiner Koeffizient	—
B_M	Spalding-Kennzahl des Massentransfers	—
B_T	Spalding-Kennzahl des Wärmetransfers	—
C	Normierte Reaktionsfortschrittsvariable	—
C_A	Koeffizient der Zusatzmasse	—
C_D	Widerstandskoeffizient	—
$C_{f,d}$	Reibungskoeffizient	$\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$
C_u	Cunningham-Korrekturfaktor	—
C_μ	Koeffizient des k - ε -Modells	—
$D_{g,d}^t$	Turbulenter Gas-Tropfen-Interaktionskoeffizient	m/s^2
D_ξ	Diffusionskoeffizient des Skalars ξ	m/s^2
D_k	Diffusionskoeffizient des Skalars k	m/s^2
E_{coll}	Kollisionseffizienz	—
F_i	Komponente des Driftgeschwindigkeitsvektors	m/s^2
G	Gruppenverbrennungszahl	—
G_k	Produktion der turbulenten kinetischen Energie	m^2/s^3
I_t	Turbulenzintensität	—
K_v	Verdampfungsrate	m^2/s
L	Mittlere Distanz zwischen den Mittelpunkten der Tropfen	m
L_k	Knudsen-Schichtdicke	m
L_v	Latente Verdampfungswärme	$\text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2 \cdot \text{mol}$
$M_{j,p}$	Kräfte an der Phasengrenzfläche auf die Phase p	$\text{kg} \cdot \text{m}/\text{m}^3 \cdot \text{s}^2$
$M_{j,p}^{\text{TD}}$	Turbulente Dispersionskraft	$\text{kg} \cdot \text{m}/\text{m}^3 \cdot \text{s}^2$
\mathcal{M}_N	N ter Momentenraum	*
M_ξ	Molekulares Gewicht der Spezies ξ	kg/mol
N_s	Sektionsanzahl	—
\dot{Q}	Wärmequelle oder -senke	$\text{J}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$
$Q_{\text{coal}}^+/Q_{\text{coal}}^+$	Quell-/Senkenterm der Koaleszens	—
R	Universelle Gaskonstante	$\text{J}/\text{mol} \cdot \text{K}$
R_ϕ	Driftgeschwindigkeit der Tropfengröße ϕ	*
S	Allgemeiner Quellterm ϕ	*
T	Temperatur	K

V	Volumen	m^3
X_ξ	Molanteil der Spezies ξ	—
Y_s	Massenanteil des verdampften Brennstoffs auf der Tropfenoberfläche ξ	—
Y_ξ	Massenanteil der Spezies ξ	—
Y_∞	Massenanteil des verdampften Brennstoffs ξ	—
Z	Mischungsbruch	—
\overline{Z}	Tropfenbeladung	—
$\overline{Z'^2}$	Varianz des Mischungsbruchs	—

Lateinische Kleinbuchstaben		Einheit
a	Streckungsrate	$1/\text{s}$
$c_{p,\xi}$	Spezifische Wärmekapazität der Spezies ξ bei konstantem Druck	$\text{J}/\text{kg}\cdot\text{K}$
\bar{c}_{Mol}	Mittlere Relativgeschwindigkeit zwischen den Gasmolekülen	m/s
d	Tropfendurchmesser	m
d_L	Tropfendurchmesser	m
f	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	—
f_2	Verdampfungskorrekturterm	—
g_i	Komponente des Gravitationsvektors	m/s^2
$g_{\xi,i}$	Auf die Spezies ξ wirkende Volumenkräfte in Koordinatenrichtung j	m/s^2
h	Spezifische Enthalpie des Gemischs	J/kg
h_v	Latente Verdampfungswärme	J/kg
k	Turbulente kinetische Energie	m^2/s^2
k_b	Geschwindigkeitskoeffizient der Vorwärtsreaktion	$\text{kg}/\text{kmol}\cdot\text{s}$
k_f	Geschwindigkeitskoeffizient der Rückwärtsreaktion	$\text{kg}/\text{kmol}\cdot\text{s}$
$k_{g,d}$	Gas-Tropfen-Geschwindigkeitskovarianz	m^2/s^2
l_{int}	Integrales Längenmaß	m
m	Masse	kg
$m_{d,q}$	Moment q ter Ordnung der NDF des Durchmessers	*
p	Druck	Pa
p_n	n tes kanonisches Moment	—
p_{sat}	Sättigungsdruck	Pa
r_b	Vorwärtsreaktionsrate	$\text{kmol}/\text{m}^3\cdot\text{s}$
r_f	Rückwärtsreaktionsrate	$\text{kmol}/\text{m}^3\cdot\text{s}$
s_L	Laminare Brenngeschwindigkeit	m/s
s_t	Turbulente Brenngeschwindigkeit	m/s

t	Zeit	s
u_i	Komponente des Geschwindigkeitsvektors	m/s
$u_{i,\text{drift}}$	Komponente des Driftgeschwindigkeitsvektors	m/s
x_i	Komponente des Positionsvektors	m
z_e	Elementmassenbruch des Elements e	—

Griechische Großbuchstaben		Einheit
$\Gamma_{\zeta,\xi}$	Binärer Massendiffusionskoeffizient	m ² /s
$\Delta H_{m,v}$	Verdampfungsenthalpie	kg·m ² /s ² ·mol·K
$\Delta V_{m,v}$	Verdampfungsbedingte Volumenänderung	m ³
Δ_s	Temperaturdifferenz zur Tropfenoberfläche	K
Δ_v	Diffusionsvolumen	—
Δt	Zeitschrittweite	s
Φ	Äquivalenzverhältnis	—
Ψ_k	Momentenfluss über die Sektionsgrenze ϕ_k	*
Ψ_{k-1}	Momentenfluss über die Sektionsgrenze ϕ_{k-1}	*

Griechische Kleinbuchstaben		Einheit
α_e	Molekularer Akkomodationskoeffizient	—
α_p	Volumenanteil der Phase p	—
β	Verdampfungsparameter	—
β_a	Präexponentieller Faktor	—
γ	Isentropenexponent	—
δ_{ij}	Kronecker-Delta	—
ε	Turbulente Dissipation	m ² /s ³
η	Kolmogorov-Längenmaß	m
$\eta_{g,d}$	Verhältnis der Tropfen-Turbulenz-Interaktionszeit zur Tropfenrelaxationszeit	—
θ	Driftgeschwindigkeit der Temperatur	—
$\theta_{1,2,3}$	Dimensionslose Koeffizienten	—
κ	Wellenzahl	—
λ	Wärmeleitfähigkeit	W/m·K
λ_ℓ	Mittlere freie Weglänge der Gasmoleküle	m
λ_L	Verbrennungsluftverhältnis	—
μ	Dynamische Viskosität	kg/m·s

μ^t	Turbulente dynamische Viskosität	$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$
ν'/ν''	Stöchiometrischer Koeffizient	—
ν_c	Kollisionsfrequenz	$1/\text{s}$
ρ	Dichte	kg/m^3
σ	Oberflächenspannung	$\text{kg}\cdot\text{m}/\text{m}\cdot\text{s}^2$
τ_c	Mittlere Zeit zwischen Kollisionen	s
τ_{chem}	Charakteristisches Zeitmaß der Reaktion	s
τ_d	Tropfenrelaxationszeit	s
τ_f	Charakteristische Zeitskala der Strömung	s
$\tau_{g,d}$	Tropfen-Turbulenz-Interaktionszeit	s
τ_{ij}	Komponente des viskosen Spannungstensors	$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}^2$
τ_{mix}	Charakteristisches Zeitmaß der Mischung	s
τ_η	Kolmogorv-Zeitmaß	s
ν	Kinematische Viskosität	m^2/s
ν_η	Kolmogorv-Geschwindigkeit	m/s
ϕ	Charakteristisches Größenmaß der Tropfen	*
ϕ	Skalare Größe	*
χ_p	Indikatorfunktion der Phase p	—
ω	Allgemeiner Quellterm	*

Akzente

$\dot{\prime}$	Zeitliche Fluktuation
$\dot{*}$	Reinform
\cdot_{atm}	Atmosphärendruck
\cdot_{boil}	Siedetemperatur
\cdot_{b}	Verbrannter Zustand
$\dot{\cdot}_{\text{cond}}$	Konduktion
$\dot{\cdot}_{\text{coal}}$	Koaleszens
\cdot_{crit}	Kritischer Wert
\cdot_{d}	Tropfen/disperse Phase
\cdot_{drift}	Driftgeschwindigkeit
\cdot_{eff}	Effektiver Wert
$\dot{\cdot}_{\text{evap}}$	Massentransfer
\cdot_{eq}	Gleichgewichtsansatz
$\dot{\cdot}_{\text{force}}$	Kraft
\cdot_{g}	Gasphase

\cdot_{heat}	Wärmetransfer
\cdot_k	Sektion
\cdot_{mass}	Massentransfer
\cdot_{max}	Maximum
\cdot_{min}	Minimum
\cdot_n	DQMOM-/Quadraturpunkt
\cdot_{neq}	Nicht-Gleichgewichtsansatz
\cdot_p	Beliebige Phase
\cdot_r	Reduziert
\cdot_{ref}	Referenzwert
\cdot_{rel}	Relativ
\cdot_s	Oberfläche
\cdot_{scaled}	Skalierte Variable
\cdot_{sat}	Sättigungszustand
\cdot_{st}	Stöchiometrischer Zustand
\cdot_t	Turbulenter Zustand
\cdot_u	Unverbrannter Zustand
\cdot_{ξ}	Spezies

Operatoren

$\langle \cdot \rangle$	Mittelungsprozedur
$\bar{\cdot}$	Zeitliche Mittelung
$\tilde{\cdot}$	Favre-Mittelung
$\hat{\cdot}$	Normalisierung

Dimensionslose Kennzahlen

Da	Damköhler-Zahl
Kn_d	Tropfen-Knudsen-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Nu	Nusselt-Zahl
Oh	Ohnesorge-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re_d	Tropfen-Reynolds-Zahl

Re_t	Turbulente Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl
Sh	Sherwood-Zahl
St	Stokes-Zahl
We	Weber-Zahl

Abkürzungsverzeichnis

ACARE *Advisory Council for Aeronautics Research in Europe*

CDS *Central Differencing Scheme*

CFD *Computational Fluid Dynamics*

CFL *Courant-Friedrich-Lewis*

CSVM *Coupled Size-Velocity Method*

DEM *Discrete Element Method*

DNS *Direct Numerical Simulation*

DQbSMoM *Direct Quadrature based Sectional Method of Moments*

DQMoM *Direct Quadrature Method of Moments*

DSMC *Direct Simulating Monte Carlo*

EMSM *Eulerian Multi-Size Moment*

EBU *Eddy break-up*

FDM *Finite Difference Method*

FEM *Finite Element Method*

FGM *Flamelet Generated Manifold*

FPI *Flame Prolongation of Intrinsic low-dimensional manifolds*

FVM *Finite Volume Method*

ICAO *International Civil Aviation Organization*

jNDF *Joint Number Density Function*

KV *Kontrollvolumen*

LES *Large Eddy Simulation*

LHS *Left Hand Side*

LIF *Laser-Induced Fluorescence*

LPP *Lean-Premixed Prevaporized*

LDI *Lean Direct Injection*

ME *Maximum Entropy*

NDF *Number Density Function*

NIST *National Institute of Standards and Technology*

PD *Product-Difference*

PDA *Phase Doppler Anemometry*

PDF *Probabilty Density Function*
PTC *Particle Trajectory Crossing*
QUICK *Quadratic Interpolation for Convective Kinematic*
QMoM *Quadrature Method of Moments*
RANS *Reynolds-averaged Navier-Stokes Equations*
RHS *Right Hand Side*
RQL *Rich Burn, Quick Quench, Lean Burn*
SM *Sectional Method*
SOR *Successive Over-Relaxation*
SIMPLE *Semi-implicit Method for Pressure Linked Equations*
TCS *Turbulent Combustion of Sprays*
UDS *Upwind Differencing Scheme*
UTC *University Technology Centre*
VOF *Volume of Fluid*

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand im Rahmen meiner knapp vierjährigen Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter des Fachgebietes Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt. Mein Dank gebührt daher im Besonderen Herrn Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka, dem Leiter des Fachgebiets, sowie Herrn Prof. Dr. Amsini Sadiki für die eröffnete Möglichkeit der Durchführung dieser Promotion. Ich bedanke mich für die mir zugestandenen Freiheiten, die fachlichen Hilfestellungen und für das Vertrauen in meine Arbeitsweise. Weiterhin danke ich Herrn Prof. Dr. Jens Lang persönlich für sein entgegengebrachtes Interesse und die Übernahme des Korreferats, sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. Samuel Schabel, Herrn Prof. Dr. Bernhard Schweizer und Herrn Prof. Dr.-Ing. Matthias Oechsner für ihre Bereitschaft die Doktorprüfung durchzuführen.

Ein großer Dank geht an meinen Vorgänger Herrn Dr.-Ing. Werner Gumprich, der mir bereits während der Master-Thesis stets mit Rat zur Seite stand und nie ganz das Interesse an dem Fortgang der Arbeit mit Momentenmethoden verloren hat. Darüber hinaus bedanke ich mich bei meinen Bürokollegen und Freunden für die fachlichen Diskussionen, die Hilfestellungen und die freundschaftliche Atmosphäre. Hervorheben möchte ich an dieser Stelle Herrn Dr.-Ing. Thabo Stahler, Herrn Dr.-Ing. Johannes Weinkauff, Herrn Dr.-Ing. Jean Kadavelil, Herrn Dr.-Ing. Timo Klenke, Herrn Dr.-Ing. Fernando Sacomano Filho, und Herrn Jhon Pareja Restrepo, Herrn Johannes Bode, Herrn Ilya Schevchuck, Herrn Felix Raynaud und Frau Flavia Calvacanti Miranda. Ohne die stets verständnisvolle und hilfsbereite Arbeit des Sekretariats und der IT-Abteilung wäre das Entstehen dieser Arbeit nicht möglich gewesen. Ein Dank für die kooperative und freundliche Unterstützung bei der Arbeit mit *PreciseUNS* geht an Dr.-Ing. Max Staufer und Dr.-Ing. Ruud Eggels von *Rolls-Royce Deutschland*, sowie an die *Deutsche Forschungsgemeinschaft* in Form des *Graduiertenkollegs 1344* für das Stipendium.

Meinen größten Dank richte ich an meine Verlobte Dr. Julia Oberhoffer für das Korrekturlesen und die kontinuierliche Unterstützung, insbesondere in den herausfordernden Phasen dieser Arbeit. Für ihren Rückhalt, ihre Begleitung und für die Vielfalt der mir eröffneten Möglichkeiten danke ich meinen Eltern. Meine Schwiegereltern haben mich mit Interesse und motivierenden Gesprächen begleitet, auch dafür möchte ich Dank sagen. *Last, but not least*, Philipp Schuster, mein guter Freund seit Studienbeginn, von dem ich nicht nur viel gelernt habe, sondern der mir bei scheinbar unlösbaren Problemen und Herausforderungen immer helfend zur Seite stand – auch ihm gilt mein Dank.

Und so ist es letztlich im sozialen Kontext, wie im Bereich der Naturwissenschaften immer wieder das positive Zusammenspiel unterschiedlicher Kräfte und Kompetenzen, das Neues entstehen lässt und uns in die Zukunft begleitet.

Benjamin Synek

Darmstadt, im Oktober 2017



Zusammenfassung

Simulation reaktiver Mehrphasenströmungen mit einer Momentenmethode und tabellierter Chemie

Vor dem Hintergrund des Inkrafttretens strengerer Emissionsgesetze, sowie der Entwicklung neuer Triebwerkstechnologien besteht ein hohes Interesse am Einsatz numerischer Simulationen zur Auslegung und Optimierung von Verbrennungsprozessen. Die angewendeten Modelle beinhalten Ansätze zur Beschreibung der komplexen physikalischen Phänomene wie z. B. dem Zerfall des Brennstoffstrahls, der Dispersion der Tropfen, der Interaktion der Tropfen mit der Gasphase, sowie der Massen- und Wärmetransfermechanismen. Ausgehend von der Beschreibung der Gemischbildung können für reaktive Konfigurationen somit Aussagen über die Verbrennung, bzw. deren Effizienz, sowie die Schadstoffbildung gemacht werden.

Aufgrund des hohen numerischen Aufwands sind detaillierte Betrachtungsweisen sehr aufwendig und derzeit noch nicht kommerziell anwendbar. Numerische Modelle zur Beschreibung von Spray-Simulationen basieren daher zumeist auf Verteilungsfunktionen, die zeitliche und räumliche Veränderung der Verteilungsfunktion wird mit einer kinetischen Boltzmann-Gleichung beschrieben. Zur Lösung dieser Gleichung stehen zwei Ansätze zur Verfügung: Stochastische Lagrange und Euler-basierte Momentenmethoden. Stochastische Lagrange-Methoden beinhalten hierbei zwar eine akkurate Beschreibung der auftretenden physikalischen Phänomene, der zu erwartende Rechenaufwand und die optimale Parallelisierung sind jedoch bisher herausfordernde Fragestellungen. Momentenmethoden stellen eine effiziente Alternative dar und bieten Vorteile hinsichtlich der effizienten Parallelisierung, sowie der Kopplung der Phasen. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein hybrider Ansatz angewendet, der eine quadraturbasierte Momentenmethode, die DQMoM (*Direct Quadrature method of Moments*), mit einer sektionalen Formulierung der Verteilungsfunktion kombiniert. Der Ansatz basiert hierbei auf einer Aufteilung der Verteilungsfunktion auf Basis eines *operator-splitting*-Ansatzes in einen physikalischen und phasenbasierten Raum mit der entsprechenden separaten Betrachtung der auftretenden Phänomene. Zur Beschreibung der Massen- und Wärmetransfermechanismen innerhalb der Sektionen wird die EMSM-Methode (*Eulerian Multi-Size Moment*), sowie ein realistisches Gleichgewichtsmodell von Abramzon und Sirignano angewendet.

Sobald ein zünd- und brennbares Gemisch aus Oxidator und verdampftem Brennstoff vorliegt, finden chemische Reaktionen statt. Zur numerischen Lösung der chemischen Reaktionen stehen drei grundlegende, unterschiedlich komplexe Ansätze zur Auswahl. Diese Ansätze basieren auf der Lösung weniger globaler Gleichungen, der Lösung mit Zugriff auf vorab tabellierte, chemische Reaktionen und deren Zwischenreaktionen, sowie der Lösung einer Vielzahl detaillierter Reaktionsgleichungen. Bei einer detaillierten Betrachtung wird für jede vorkommende Spezies eine Transportgleichung aufgestellt, die Lösung dieser Mechanismen ist somit sehr rechenzeitaufwendig. Die Lösung weniger globaler Gleichungen wiederum deckt viele Aspekte von Interesse nicht ab - aus diesem Grund werden oftmals tabellierte Ansätze angewendet. Die Reaktionsmechanismen werden dabei in Tabellen abgespeichert, auf die mithilfe der sog. Kontrollvariablen während der Simulation zugegriffen wird. Die Erzeugung der Tabellen erfolgt im Vorfeld der eigentlichen Simulation und basiert auf dem Ansatz, dass eine sich ausbreitende Flamme anhand einer Vielzahl kleiner, eindimensionaler Flammen dargestellt werden kann. Die Interaktion zwischen turbulenten Strukturen und chemischen Reaktionen wird mit Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen realisiert.

Die Validierung der Kopplung erfolgt im Rahmen eines polydispersen, reaktiven Sprays. Die erzielten numerischen Resultate werden mit experimentellen Resultaten von drei ausgewählten Konfigurationen des sog. Sydney-Spray-Brenners für flüssige Brennstoffe unter atmosphärischen Umgebungsbedingungen verglichen.



1 Einleitung

Verbrennungsprozesse spielen sowohl in der heutigen, als auch in der zukünftigen Energie- und Transportwirtschaft eine Schlüsselrolle. Die Verbrennung stellt hierbei eine exotherme Umsatzreaktion von eingehenden Edukten zu Produkten dar, bei der die im Brennstoff gespeicherte Energie in Form von Wärme freigesetzt wird. Die freigesetzte Wärme wird beispielsweise zur Energiegewinnung in thermischen Turbo- oder Kolbenmaschinen genutzt. Die zur Energieerzeugung aus fossilen Rohstoffen angewendeten Verbrennungsprozesse decken derzeit über 80 % des weltweiten Primärenergiebedarfs ab. Obwohl bei der Verbrennung ein Trend zur Beimischung alternativ gewonnener Energieträger besteht, werden in heutigen Verbrennungssystemen überwiegend fossile Energieträger umgesetzt.

Vor dem Hintergrund der stetig steigenden Weltbevölkerung und des damit einhergehenden gesteigerten Bedarf an fossilen Rohstoffen, sowie dem Ziel der Minderung von Emissionen ergibt sich die Aufgabe der Ausrichtung des Energiesystems in Richtung Nachhaltigkeit. Diese Aufgabe bewegt sich innerhalb eines politischen und eines ingenieurwissenschaftlichen Kontextes – die politische Ebene beinhaltet die Schaffung eines gesellschaftlichen Ziele- und Wegekonsenses in der Energiepolitik, der ökonomische und ökologische Aspekte der Verteilungsgerechtigkeit berücksichtigt. International bindende Abkommen werden sich nur dann erzielen lassen, wenn sie in einer für alle Staaten gerechten Form vorliegen und den Fragestellungen kommender Generationen standhalten können. Als Grundlage zur Bestimmung nationaler Emissionsbudgets können z. B. folgende Leitsätze des Wissenschaftlichen Beirat der Bundesregierung [1] dienen. Das Verursacherprinzip, das den heutigen Industrienationen mit historisch bedingt hohen Emissionswerten eine besondere Verantwortlichkeit zukommen lässt. Das Vorsorgeprinzip, das vor dem Hintergrund des Wissens um die Klima- und Umweltschädlichkeit der Emissionen den Entwicklungsländern eine »nachholende«, auf fossilen Energieträgern beruhende, Entwicklung untersagt, bzw. gezielt diese Entwicklung fördert, sowie das Gerechtigkeitsprinzip, das jeder Nation unter Berücksichtigung kontextsensitiver Faktoren prinzipiell die gleichen Emissionsrechte zubilligt. Nicht zuletzt muss auch immer in der Frage der Finanzierung und der Verteilung der Lasten eine Antwort gefunden werden.

Aufgabe von Wissenschaft und Technik ist es, in den nächsten Dekaden nachhaltige und effiziente Produkte zu entwickeln, die sich durch Einsparung von Brennstoffen bei gleichzeitiger Verbesserung des Wirkungsgrades auszeichnen [134]. Die heute erzielten Fortschritte in der Wissenschaft bieten hierbei eine Grundlage für die zukünftigen politischen Entscheidungen. Der Energiebedarf der wachsenden Weltwirtschaft wird, abhängig von den gewählten Rahmenbedingungen, im Zeitraum von 2015 bis 2035 um bis zu 34% steigen, wovon prognostiziert 60% durch fossile Energieträger gedeckt werden sollen (siehe Abb. 1.1). Der Zuwachs des Energieverbrauches in den Entwicklungs- und Schwellenländern wirft darüber hinaus eine Vielzahl weiterer Fragen, wie z. B. die der Verteilungsgerechtigkeit und den wirtschaftlichen, sowie technologischen Entwicklungspotentialen, auf [136]. Der Ausbau der regenerativen Energiesysteme wird dabei als Grundlage einer nachhaltigen Entwicklung weltweit stark forciert. Die Europäische Union hat so z. B. ihre Ziele für den Ausbau der erneuerbaren Energien auf 27% im Jahr 2030 vorgegeben [34]. Weltweit wird auf der Basis der Daten des Jahres 2015 bis zum Jahr 2035 eine Vervierfachung der Energieerzeugung durch erneuerbare Energien prognostiziert [136]. Die Speicherung dieser enormen Energiemenge mit dem zeit- und bedarfsgerechten zur Verfügung Stellen der Energie wird eine der herausfordernde Fragestellung sein, die die Energiewirtschaft und die Politik beschäftigen wird. Hinsichtlich der Speicherung von überschüssigem regenerativ gewonnenem Strom stellt z. B. die Hydrolyse von Wasser zu Wasserstoff eine vielversprechende Alternative bereit. Diese Verfahren werden im Allgemeinen als »Power-to-gas-Verfahren« bezeichnet. Problematisch ist im Falle von Wasserstoff z. B. die Speicherung, da aufgrund der geringen Molekülgröße eine hohe Diffusivität zu berücksichtigen ist.

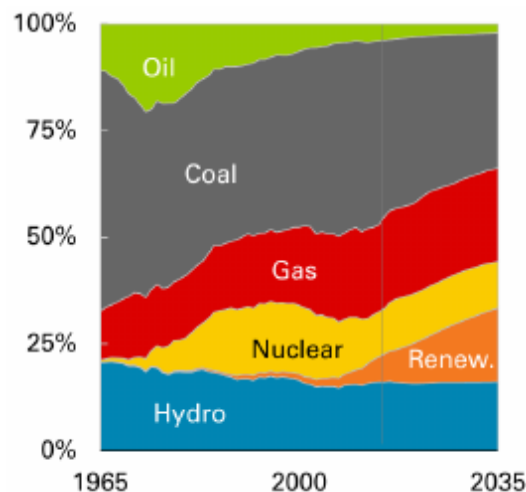


Abbildung 1.1: Prognostizierter Weltenergieverbrauch über den Zeitraum von 1965 bis 2035 [136].

Der so gewonnene Wasserstoff kann entweder zur Erzeugung von Energie in Gasturbinen selbst verwendet werden – der Vorteil liegt in der CO_2 -freien Verbrennung – oder zur Erzeugung von synthetischen, kohlenstoffbasierten Brennstoffen verwendet werden. Bei der Kombination unterschiedlicher Prozesse gilt es jedoch immer den technischen Gesamtwirkungsgrad des Prozesses, sowie die Wirtschaftlichkeit und die Standortfragen zu berücksichtigen.

Für die Verwendung von Energieträgern spielen in der Energieversorgung insbesondere ökonomische Gesichtspunkte eine entscheidende Rolle. In der Transportwirtschaft, speziell in der Luftfahrt, werden diese ökonomischen Gesichtspunkte durch die hohen Energiedichten von fossilen flüssigen Energieträgern gegenüber der Energiedichte von Batterien, sowie das weitreichende Versorgungsnetz ergänzt. Unter anderem aus diesen Gründen wird die Verbrennung von fossilen, oder auch regenerativ erzeugten, Energieträgern auf Kohlenstoff-, bzw. Kohlenwasserstoffbasis auch zukünftig weltweit eine Schlüsselrolle in der Energie- und Transportwirtschaft spielen. Besonders im kommerziellen Luftverkehr ist die Verbrennung von flüssigen Brennstoffen auf Basis von Kohlenwasserstoffen zur Zeit noch alternativlos. Ein Problem bei der Verbrennung von fossilen Energieträgern liegt u. A. in der Erzeugung des klimaschädlichen Verbrennungsproduktes CO_2 und NO_x . Die Erzeugung dieser klimaschädlichen Verbrennungsprodukte ist direkt an das Vorhandensein von Kohlenstoff in den Energieträgern, bzw. Stickstoff in der Luft gekoppelt. Ein weiterer Einflussfaktor der Schadstoffbildung ist hierbei die im System vorherrschende Temperatur. Hinsichtlich der prognostizierten Zunahme des weltweiten Primärenergiebedarfes und des Anteils an verbrennungsgestützten Prozessen ist es daher erforderlich, die Effizienz von Verbrennungssystemen, bei gleichzeitiger Reduktion klimaschädlicher Schadstoffe, zu steigern (siehe Abb. 1.2). Für ein besseres Verständnis der allgemeinen Verbrennungsprozesse, wie z. B. der Bildung von Schadstoffen, sowie zur effizienten Auslegung von komplexen Verbrennungssystemen hat sich die computergestützte Simulation als kosteneffizienter Einstieg gegenüber zeit- und kostenaufwändigen Experimenten heutzutage etabliert. Die zumeist auf einem niedrigeren *Technology readiness level* durchgeführten Simulationen dienen hierbei vornehmlich einer effizienten Ausrichtung, da sämtliche Strömungsgrößen an allen Stellen der zu berechnenden Geometrie bestimmbar sind. Computergestützte Simulationen basieren hierbei auf der Zerlegung der zu berechnenden Geometrie in eine finite Anzahl sogenannter Kontrollvolumen und der Lösung von Bilanzgleichungen der Strömungsgrößen innerhalb der Kontrollvolumen. Somit ist eine räumliche und zeitliche Auflösung komplexer Strömungsvorgänge, wie z. B. der Wärme- und Massentransferprozesse, sowie chemischer Reaktionen möglich.

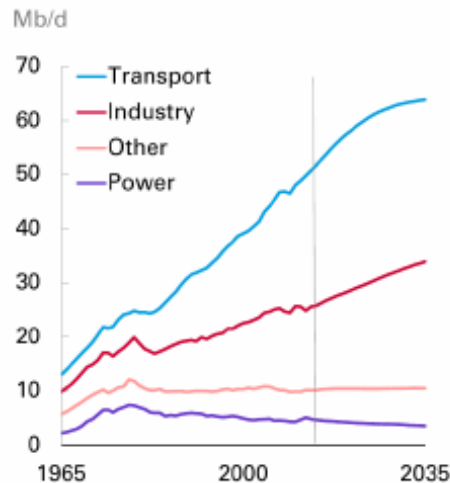


Abbildung 1.2: Prognose des Bedarfs an flüssigen Brennstoffen, basierend auf den Verbrauchern [136].

1.1 Motivation

Der Flugverkehr wird sich Prognosen folgend in dem Zeitraum von 2005 bis 2020 verzweifachen. Dieses rasche Wachstum und die Auswirkungen der Emissionen auf die Umwelt hat zu strengeren Umweltauflagen für die Zivilluftfahrt geführt. Zu nennen sind die auf internationaler Ebene von der *International Civil Aviation Organization* (ICAO) beschlossenen Vorschriften, sowie die EU-weiten Vorschriften des *Advisory Council for Aeronautics Research in Europe* (ACARE). Auch wenn die Emissionsfreisetzung, hierzu zählen u. a. die Luftschadstoffe CO_2 , H_2O , NO_x , SO_x und Rußpartikel, die nur ca. 2,4 % der weltweiten Emissionen ausmachen, so ist zu berücksichtigen, dass der Einfluss in großer Höhe zunimmt und sich die klimaschädliche Wirkung vervielfacht. Mit der Einführung verschärfter Schadstoffgrenzwerte bei Verbrennungsprozessen wurde in der Vergangenheit in vielen industriellen Bereichen ein Wechsel der Verbrennungskonzepte von einer nicht-vorgemischten hin zu einer mager-vorgemischten Verbrennung vollzogen. Die mager-vorgemischte Verbrennung zeichnet sich durch eine, im Vergleich zur stöchiometrischen Verbrennung, niedrigere Verbrennungstemperatur aus, die wiederum mit einer Minimierung der thermisch bedingten Stickoxidproduktion verbunden ist.

Bei Verbrennungsprozessen mit einem flüssigen Brennstoff wird die Verbrennungseffizienz und die Schadstoffbildung sowohl von dem in der homogenen Phase vorliegenden Gemisch aus Brennstoff und Oxidator, sowie der Charakteristik des Sprays beeinflusst. Daher ist es relevant ein detailliertes Verständnis der komplexen Vorgänge über die Massen- und Wärmetransferprozesse, sowie der Verbrennung des Brennstoffs im Inneren der Brennkammer eines Flugtriebwerks zu erlangen, um den Konflikt aus anthropogener Klimaveränderung, sowie dem Wirtschaftswachstum und dem damit verbundenen Schutz von Arbeitsplätzen in Einklang zu bringen. Ein besseres Verständnis dieser Vorgänge ist ein entscheidender Faktor, um effiziente, verbrauchoptimierte und schadstoffarme Verbrennungssysteme zu konzipieren. Um dieses anspruchsvolle Ziel zu erfüllen, arbeiten die führenden Triebwerkshersteller an der Einführung einer mageren Verbrennung innerhalb der Brennkammer. Mit diesem Konzept werden die Verbrennungstemperaturen abgesenkt, womit sich der unter Aspekten des Umweltschutzes erforderliche Schritt zur Emissionsminderung verwirklichen lässt. Dieses Potenzial wird jedoch mit einer höheren Komplexität der eingesetzten Brenner erkauft. Da die Brenner während des Starts und der Reiseflugphase mager betrieben werden sollen, wird das Brennstoff-Luft-Verhältnis während des Teillastbetriebs, also zum Beispiel im Leerlauf so klein, dass die Menge des Brennstoffs nicht mehr ausreichen würde, um eine stabile Verbrennung zu gewährleisten. Infolge der instabilen Verbrennung droht ein Verlöschen der Flamme – Magerbrennkammern werden deshalb mit separaten Pilotbrennern ausgestattet, um eine sichere Flammenhaltung jederzeit zu gewährleisten. Die Entwicklung von Auslegungsgrundlagen und weitere Optimierungen

bedürfen der Zusammenarbeit von numerisch und experimentell erzielten Resultaten. Zu den von den Triebwerksherstellern erprobten neuen Konzept für die magere Verbrennung innerhalb der Brennkammer zählt die magere Direkteinspritzung, die magere Vormischverbrennung mit partiell vorverdampftem Spray, sowie das gestufte Verbrennungsprinzip.

Lean direct injection – Um die Zerstäubung des flüssigen Brennstoffs und den Mischungsprozess innerhalb der heterogenen und der homogenen Phase zu verbessern, wird der Brennstoff mit hohem Druck in einen stark verdrahten, die Düse umgebenden Luftmassenstrom eingespritzt. Wird zudem anstelle eines Einzelinjektors eine größere Anzahl kleinerer Injektoren eingesetzt, kann aufgrund der besseren Durchmischung ein kleinerer Bauraum realisiert werden. Ein kleinerer Bauraum wiederum geht mit kürzeren Verweilzeiten hinsichtlich der Bildung von Schadstoffen einher. Man spricht in diesem Zusammenhang von einer mageren Direkteinspritzung, der sog. *Lean Direct Injection* (LDI). In den momentanen Entwicklungsstufen werden die Pilotbrenner direkt in die Hauptbrenner integriert. Die Menge an vom Pilotbrenner erzeugten Schadstoffen, sowie der Umsatz des Brennstoffs, die zur Betriebstauglichkeit der Magerbrennkammern demonstriert werden müssen, hängen wiederum von der optimalen Anpassung der Strömungsfelder und der Gestaltung der Brennstoffeinspritzung der Brenner ab.

Lean premixed, prevaporized – Eine weitere Möglichkeit der Reduktion des NO_x -Ausstoßes liegt darin, alternative Konzepte zu der bisher eingesetzten nicht-vorgemischten Verbrennung zu entwickeln. Ein Entwicklungsziel ist hierbei der Einsatz einer vorgemischten Verbrennung – das zugrunde liegende Konzept wird als *Lean-Premixed Prevaporized* (LPP) bezeichnet. Es handelt sich hierbei um ein mager-vorgemischtes, vorverdampftes Brennstoffgemisch, das ein weiterführendes Konzept zur LDI darstellt. Eine vorgemischte Verbrennung weist gegenüber einer nicht-vorgemischten Verbrennung ein anderes Äquivalenzverhältnis von Brennstoff zu Oxidator in, bzw. vor der Reaktionszone auf, so dass die Verbrennung bei Luftüberschuss im mageren Bereich stattfindet. Durch die hieraus resultierenden geringeren Temperaturspitzen wird die thermische NO_x -Bildung reduziert. Die Anforderungen an die Bereitstellung des Gemischs aus Brennstoff und Oxidator für den LPP-Ansatz sind jedoch vergleichsweise hoch, da in Nähe der Flammenfront eine homogene Mischung von Brennstoff und Luft vorliegen muss, um das gewünschte, magere Äquivalenzverhältnis in der Reaktionszone zu erreichen. Bei unzureichender Zerstäubung eines flüssigen Brennstoffs können u. A. Brennstoffsträhne in der Primärzone auftreten, wodurch verdampfungsbedingt lokal ein stöchiometrisches Verhältnis vorliegt. Ein stöchiometrisches Verhältnis wiederum begünstigt durch die höheren Temperaturen die Bildung von Schadstoffen. Zusätzlich zur Brennstoffaufbereitung stellt das LPP-Konzept hohe Anforderungen an die Betriebssicherheit der Flugtriebwerke hinsichtlich der Gefahr der Selbstentzündung, des Flammenverlöschens sowie der Brennkammerschwingungen infolge von Flammeninstabilitäten [124]. Diese vergleichsweise hohen Voraussetzungen der Umsetzung von LPP-Brennkammern erschweren bis zum jetzigen Zeitpunkt eine kommerzielle Anwendung.

Rich burn, quick quench, lean burn – Eine Alternative hierzu bietet eine gestufte Verbrennung nach dem sog. *Rich Burn, Quick Quench, Lean Burn* (RQL)-Prinzip. In der sogenannten RQL-Brennkammer wird eine Stufung von einer fetten zu einer mageren Verbrennung vorgenommen. Dieser Vorteil wird in Brennkammern von Flugtriebwerken zur Stabilisierung der Verbrennung eingesetzt. Die Reduzierung der Schadstoffemissionen, speziell der Stickoxide NO_x , wird hierbei in einem begrenzten Rahmen durch eine gestufte Verbrennung erreicht. Hierbei wird die Umsetzung des Brennstoffs mit einer fetten Verbrennung eingeleitet, wobei anschließend der stöchiometrische Bereich durch die intensive Zumischung von Luft, dem sog. Quenchen, in den mageren Bereich verlagert wird [11, 124]. Die RQL-Brennkammer besteht dabei prinzipiell entsprechend aus zwei voneinander getrennten Verbrennungszonen. In der ersten Zone wird eine überstöchiometrische Verbrennung in einem Bereich mit niedrigen thermischen NO_x -Bildungsraten vorgenommen. In der zweiten unterstöchiometrischen Verbrennungszone wird die vollständige Verbrennung bei Überschuss an Sauerstoff abgeschlossen. Der Übergang zwischen den beiden Verbrennungszonen muss hierbei sprunghaft

erfolgen, damit keine Bereiche mit stöchiometrischen Verbrennungsbedingungen entstehen können, die aufgrund der höheren Verbrennungstemperatur durch starke, thermische NO_x-Bildung gekennzeichnet sind.

Die Verbrennung in technisch relevanten Systemen ist i. A. ein komplexer Vorgang, der vielfältige strömungsmechanische, physikalische und chemische Prozesse, sowie deren Interaktion umfasst und sich über einen großen Bereich von Zeit- und Größenskalen erstreckt. Zu den involvierten, und somit abzubildenden Aspekten zählen zum Beispiel:

Komplexe Geometrie – Technische Verbrennungssysteme sind zumeist komplexere Konstruktionen mit einer Vielzahl von Komponenten mit unterschiedlicher Größen und Anforderungen. Die geometrischen Eigenschaften können hierbei zudem auch zeitlich veränderlich sein. Thermische und mechanische Kräfte führen zudem zu mikroskopischen oder makroskopischen Veränderungen des Systems.

Dynamik und Turbulenz – Technische Verbrennungen sind stets ein dynamischer, instationärer Prozess, der sowohl Instationaritäten in Form von turbulenten Strukturen, als auch in Form von Zünd- und Verlöschungsvorgängen, umfasst. Die Strömungsgeschwindigkeit führt dabei in Wechselwirkung mit den geometrischen Eigenschaften zur Entstehung und Ausbildung turbulenter Strukturen.

Mehrphasenströmung und Phasenübergänge – Bei Systemen mit flüssigen oder festen Brennstoffen treten wechselseitige Interaktionen zwischen der kontinuierlichen Phase und der dispersen Phase auf. Der Phasenübergang in die Gasphase spielt eine entscheidende Rolle für die anschließende Verbrennung. Die Mischung zwischen verdampftem Brennstoff und Oxidator durch konvektiven und diffusiven Stofftransport entscheidet über die lokale stoffliche Zusammensetzung und darüber, ob das Gemisch zünd- und brennbar ist. Die Zusammensetzung stellt die Rahmenbedingungen für die chemischen Reaktionen dar und beeinflusst somit maßgeblich den thermokinetischen Zustand nach der Verbrennung.

Chemische Reaktionen, Zündung, Verlöschung und Wärmefreisetzung – Die thermodynamischen und reaktionskinetischen Abläufe entscheiden über die Effizienz der Verbrennung, sowie über die Bildung von Schadstoffen, wie z. B. Ruß, unverbrannten Kohlenwasserstoffen, Kohlenstoffmonoxid oder Stickoxiden. Der Wärmetransport ist in Hinblick auf die Zündung entscheidend für die Stabilisierung der Verbrennung. Der konvektive oder strahlungsbedingte Wärmeübergang auf die Wände des Systems kann zu einer Verlangsamung der chemischen Reaktion oder lokaler Verlöschung führen und beeinflusst so das Flammenverhalten und die Schadstoffproduktion.

Bei der Auslegung zukünftiger Verbrennungssysteme sind experimentelle Untersuchungen unerlässlich. Diese Untersuchungen sind jedoch zeit- und kostenintensiv, sowie oftmals schwer durchführbar, da die Komplexität und die geometrischen Eigenschaften des Verbrennungssystems die Zugänglichkeit mit der entsprechenden Messtechnik erschwert. Mithilfe computergestützter Simulationen moderner Verbrennungssysteme können viele der genannten Probleme ohne finanzielle Risiken bei der Auslegung vorab minimiert, und somit eine zeit- und kostenoptimierte Entwicklung vorangetrieben werden. Das Verständnis der oben aufgeführten Vorgänge ist essentiell für die Auslegung und Optimierung von Verbrennungssystemen. Die Wechselwirkungen der genannten Aspekte macht die theoretische Beschreibung der technischen Verbrennung jedoch komplex, sodass i. A. lediglich mehr oder weniger isolierte und vereinfachte Teilaspekte betrachtet werden können. In dieser Arbeit steht die Weiterentwicklung von Simulationswerkzeugen zur Berechnung von reaktiven Mehrphasenströmungen im Fokus. Die numerische Simulation von Verbrennungssystemen mit flüssigen Brennstoffen verbindet die naturwissenschaftlichen Teilbereiche der Strömungsmechanik, der Verbrennungstechnik und der numerischen Mathematik, sowie die Informatik miteinander und stellt im Ganzen eine erhebliche Herausforderung dar.

1.2 Stand der Forschung

Bei Betrachtung des Einspritzvorgangs von flüssigem Brennstoff in die Triebwerksbrennkammer liegt eine Mehrphasenströmung, bestehend aus der kontinuierlichen Gasphase und der dispersen Phase, den Tropfen, vor. Mehrphasenströmungen sind durch eine Vielzahl physikalischer Phänomene wie z. B. der Zerstäubung des Brennstoffstrahls mit dem Primär- und Sekundärerfall, der Tropfen-Tropfen- bzw. Tropfen-Gas-Interaktionen, der Dispersion der Tropfen, sowie des Massen- und Wärmetransfers charakterisiert, siehe hierzu z. B. [108].

Die numerischen Methoden zur Beschreibung von Zweiphasenströmungen lassen sich in drei Ansätze – eine mikroskopische, eine mesoskopische und eine makroskopische Beschreibung – unterteilen. Die mikroskopische Beschreibung findet vor allem im Rahmen von *Direct Numerical Simulation* (DNS) und *Large Eddy Simulation* (LES) Anwendung, da die Grenzfläche zwischen den Brennstofftropfen und der umgebenden, kontinuierlichen Phase sehr akkurat wiedergegeben werden kann. Zu nennen sind an dieser Stelle die *Volume-of-fluid*-Methode [59, 141], die *Level-set*-Methode [58, 94], und die *Ghost-fluid*-Methode [31], sowie hieraus kombinierte, hybride Methoden [23, 86]. Mikroskopische Betrachtungsansätze eignen sich hierbei insbesondere für die Beschreibung des Primär- und Sekundärerfalls. Einschränkend wirkt sich aus, dass das Rechengitter hinreichend fein aufgelöst sein sollte, um den Einfluss der kleinsten Tropfen noch bestimmen zu können. Eine makroskopische Beschreibung hingegen führt zu einem hohen Modellierungsanteil und findet zumeist im Rahmen eines gemittelten Multi-Fluid-Ansatzes, wie z. B. der Euler-Euler-Methode, Anwendung. Der Multi-Fluid-Ansatz geht hierbei mit einem hohen Rechenaufwand einher, da für jede betrachtete charakteristische Größe ein Satz von Transport- und Erhaltungsgleichungen gelöst werden muss. Desweiteren erlauben gemittelte Werte keine Aussage über die auftretenden Maximalwerte. Da mikroskopische Methoden derzeit noch zu zeit- und kostenaufwändig für einen Einsatz in realitätsnahen Konfigurationen sind, und makroskopische Methoden einen vergleichsweise großen Modellierungsanteil zur Darstellung auftretender Phänomene beinhalten, wird zur Beschreibung von polydispersen Sprays oftmals auf Verteilungsfunktionen, die mithilfe einer Boltzmann-Gleichung gelöst werden, zurückgegriffen. Zur numerischen Simulation polydisperser Mehrphasenströmungen stehen zwei grundlegende Strategien, der sog. stochastische Euler-Lagrange- und der Euler-Euler-Modellierungsansatz, zur Verfügung. Der im Rahmen dieser Arbeit verfolgte Ansatz der Beschreibung basiert auf der Euler-Euler-Methode. Bei dieser Methode werden die kontinuierliche und die disperse Phase als sich durchdringende Kontinuen betrachtet, wobei die Beschreibung der Interaktion zwischen den Phasen nicht direkt möglich ist, sondern auf Modellierungsansätzen beruht. Insbesondere im Zusammenhang von Spray-Simulationen haben sich die Euler-basierten Momentenmethoden als akkurate und robuste Alternative gegenüber diesen beiden Methoden etabliert.

Insbesondere der Aspekt der optimalen Parallelisierung ist bei Lagrange-Methoden schwierig, da die Arbeitsbelastung der Prozessoren abhängig vom Volumenanteil der dispersen Phase im jeweiligen Kontrollvolumen ist. Im Gegensatz hierzu stehen die Momentenmethoden, die auf einer Lösung der Tropfenverteilungsfunktion in jedem Kontrollvolumen des Rechengitters basieren. Die Kenntnis der Verteilungsfunktion $f(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \phi, T)$ ist hierbei nicht explizit erforderlich, da die Verteilungsfunktion anhand der sie beschreibenden Momente dargestellt werden kann:

$$m_{qlmp\theta}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \phi^q u_1^l u_2^m u_3^p T^\theta f(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \phi, T) dT d\phi du_1 du_2 du_3, \quad (1.1)$$

wobei q, l, m, p und θ die Ordnung der Momente in Bezug auf eine charakteristische Tropfengröße, z. B. der Oberfläche, sowie der Tropfengeschwindigkeit und -temperatur angeben. Eine Momententransformation der Williams-Spray-Gleichung führt auf einen Satz von Erhaltungs- und Transportgleichungen, die den Gleichungen der kontinuierlichen Phase ähnlich sind, was wiederum die Kopplung zwischen den beiden Phasen vereinfacht.

Aus der Integration der Williams-Spray-Gleichung resultieren nicht-lineare Terme, die mithilfe der von Autor McGraw zur Schließung eingeführten *Quadrature Method of Moments* (QMoM) gelöst werden können. Der Ansatz der QMoM basiert auf der Approximation der Verteilungsfunktion anhand einer Summe von gewichteten Dirac-Delta-Funktionen:

$$f(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \phi, T) \approx \sum_{n=1}^N w_n \delta(\phi - \phi_n(\mathbf{x}, t)) \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_n(\mathbf{x}, t)) \delta(T - T_n(\mathbf{x}, t)), \quad (1.2)$$

wobei ϕ_n , u_n und T_n die Werte der charakteristischen Größe ϕ , der Geschwindigkeit und der Temperatur auf der Abszisse angibt. Der Term w_n entspricht hierbei der Gewichtung, die der Anzahl an Tropfen pro Volumeneinheit entspricht. Die Gewichtung und der dazugehörige Abzissenwerte werden bei diesem Ansatz mit dem PD-Algorithmus bestimmt, die Berechnung der Momente $m_{qlmp\theta}$ der Verteilungsfunktion werden wie folgt bestimmt:

$$m_{qlmp\theta}(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^N w_n \phi_n^q u_{1,n}^l u_{2,n}^m u_{3,n}^p T_n^\theta. \quad (1.3)$$

In Gleichung (1.3) repräsentiert die Summe über N Quadraturpunkte eine sog. numerische Integration. Dieser Standardansatz beinhaltet die Lösung von Transportgleichungen der Momente, wobei die Berechnung der Gewichtung und der Abzissenwerte unter Anwendung des PD-Algorithmus [45] im Anschluss an jede Iteration erneut durchgeführt wird. Marchisio und Fox [79] haben, basierend auf der direkten Berechnung der Gewichtung und der Abzissenwerte hieraus den Ansatz der *Direct Quadrature Method of Moments* (DQMoM) formuliert [35, 79]. Die DQMoM beinhaltet eine akkurate Beschreibung der Verteilungsfunktion, die Rekonstruktion erfolgt auf Basis der Methode der maximalen Entropie. Die Kopplung mit dem Multi-Fluid-Ansatz ist aufgrund der direkten Berechnung vergleichsweise einfach realisierbar.

Der Ansatz der *Direct Quadrature based Sectional Method of Moments* (DQbSMoM) [50, 52] basiert ebenfalls auf dem direkten Transport der Gewichtung und der Abzissenwerte, beinhaltet dabei jedoch zusätzlich eine *Sectional Method* (SM) [27, 66, 77, 112]. Die sektionale Formulierung der Momentenmethode ist durch die akkurate Beschreibung der verdampfenden Tropfen und des konvektiven Transports gekennzeichnet. Die Verteilungsfunktion wird hierbei innerhalb der jeweiligen Sektion bestimmt. Im Rahmen vorliegender Arbeit ist die Geschwindigkeit der Tropfen konditioniert auf die Tropfengröße. Die monokinetische Annahme führt zu Diskretisierungsfehlern beim konvektiven Transport und bei Strömungen mit einer hohen Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen. Da die Stabilität von Momentenmethoden sowohl von der Anzahl, als auch von der Ordnung der betrachteten Momenten abhängt, führt eine Erhöhung der Momente zu größeren und dünn besetzten Matrizen, die wiederum zu Stabilitätsproblemen bei der Berechnung der Eigenwerte führen. Die Aufteilung in Sektionen bietet den Vorteil, dass die Anzahl an Momenten insgesamt zwar erhöht werden kann, aber die Stabilitätsprobleme durch die Approximation innerhalb der jeweiligen Sektion vermieden werden können [52]. Nach dem bestem Wissen des Autors gibt es sowohl im reaktiven, als auch im nicht-reaktiven Bereich zwar publizierte Anwendungsbeispielen für quadraturbasierte Momentenmethoden, jedoch bisher noch keine im Kontext reaktiver Mehrphasenströmungen mit sektionsbasierter Formulierung in einer realistischen experimentellen Konfiguration.

Zur Simulation der chemischen Reaktionen reaktiver Sprays stehen drei grundlegende Ansätze auf unterschiedlichem Komplexitätsniveau, und dem zugrundeliegenden Modellierungsaufwand, zur Verfügung. Diese Ansätze basieren auf der Lösung weniger globaler Gleichungen, Ansätze mit tabellierten Reaktionen und deren Zwischenreaktionen, sowie die Lösung einer Vielzahl detaillierter Reaktionsgleichungen zur Auswahl. Die Interaktion von Verbrennung und Turbulenz wird bei diesen Modellen u. A. mithilfe turbulenzbasierter Methoden oder Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen beschrieben. Realistische Spray-Systemen umfassen hierbei eine Vielzahl von Reaktionen, in denen Moleküle in Unterprodukte zerfallen,

beispielsweise in kleinere Moleküle oder Radikale und einzelne Atome, bevor die finalen Produkte entstehen. Für jede vorkommende Spezies wird eine Transportgleichung aufgestellt, die Lösung detaillierter chemischer Mechanismen ist rechenzeitaufwendig, da jede Transportgleichung einen chemischen Quellterm beinhaltet, der wiederum an die anderen Quellterme gebunden ist. Die Steifigkeit des resultierenden Systems reduziert die mögliche Zeitschrittweite und führt folglich zu hohem Rechenaufwand. Aus diesem Grund werden Reaktionsmechanismen oftmals in vorgefertigten Tabellen abgespeichert, auf die während der Simulation zugegriffen wird.

Der tabellarische Ansatz basiert hierbei auf einer separaten, detaillierten Flammenberechnung im Vorfeld der eigentlichen Simulation. Diese Berechnung basiert auf der Idee, dass eine sich ausbreitende Flamme anhand eindimensionaler Flammen dargestellt werden kann, die in einer Tabelle zusammengefasst werden und ist als »Stand der Technik« zu bezeichnen [92]. Der Tabellenzugriff während der Simulation wird mithilfe sog. Kontrollvariablen realisiert. Weitere Spezies, die Dichte und die Temperatur, sowie zusätzliche thermodynamische Eigenschaften werden als Funktion der Kontrollvariablen ebenfalls in der Tabelle gespeichert. Die Interaktion turbulenter Strukturen und chemischer Reaktionen wird z. B. mithilfe einer sog. vorangenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, der sog. *presumed Probability Density Function* (PDF)-Ansatz, realisiert. Bei diesem Ansatz werden vorab Verteilungsfunktionen für den Mischungsbruch und die Reaktionsfortschrittsvariable angenommen. Einen gängige Ansatz stellt die Verwendung einer β -PDF, basierend auf dem Mittelwert und der Varianz, für den Mischungsbruch und einer mittelwertabhängigen δ -PDF für die Reaktionsfortschrittsvariable dar [75]. Zur Darstellung der Chemie-Turbulenz-Interaktion kann, anstelle der vorangenommenen Verteilungsfunktion, ebenfalls eine momentenbasierte Verteilungsfunktion angewendet werden [101]. Die Verteilungsfunktion wird bei diesem Ansatz, ebenso wie z. B. die Verteilungsfunktion der Tropfendurchmesser, durch Lösen von Transportgleichungen von beschreibenden Momenten rekonstruiert. Eine momentenbasierte Verteilungsfunktion stellt hierbei einen Kompromiss zum detaillierten, jedoch rechenzeitintensiven Ansatz der transportierten Verteilungsfunktion dar und einer vorangenommenen Verteilungsfunktion. Bei Simulation von Sprays ist darüber hinaus noch der Einfluss der Massen- und Wärmetransferprozesse der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase zu beachten, erste Arbeiten hierzu finden sich z. B. bei [65, 105].

Technische Verbrennungssysteme werden i. A. entsprechend der Einbringung des Brennstoffs in vorge-mischte und nicht-vorgemischte Systeme unterteilt. Liegt der Brennstoff in einer festen oder flüssigen Phase vor, finden zuerst die sog. heterogenen Reaktionen, z. B. bei flüssigen Brennstoffen die Verdampfung des Sprays, statt, bevor die homogene Verbrennungsreaktion in der Gasphase stattfinden kann. Hervorhebenswert sind unter Anderem hierbei folgende Aspekte des Verdampfungs-, bzw. Verbrennungsprozesses. Der Einfluss der Tropfen auf die Strömung und der Tropfenverdampfung auf die Flammenpropagation, der Einfluss turbulenter Strukturen auf den Verbrennungsprozess, unterschiedliche Verbrennungsmoden von flüssigen Brennstoffen, sowie die Geschwindigkeit und die Reversibilität chemischer Reaktionen an der Flammenfront, siehe hierzu z. B. [9, 82, 139]. Die Verbrennung von Tropfen eines Sprays hinsichtlich der möglichen Verbrennungsmoden und Erscheinungsformen der Flamme wird von Reveillon et al. Reveillon u. Vervisch vorgestellt. Eine Arbeit zur Unterscheidung zwischen einem vorgemischten und nicht-vorgemischtem Verbrennungsregime auf Basis eines Flammensensors findet sich bei Aschmoneit [7]. Die Anwendbarkeit der Momentenmethoden im Rahmen turbulenter, reaktiver Simulationen wird z. B. von Ali et al. [6] und Sibra et al. [117] gezeigt.

Die Entwicklung der Momentenmethoden befindet sich derzeit jedoch noch in einem frühen Stadium, in dem überwiegend numerische Resultate akademischer Anwendungsfälle veröffentlicht werden. Der mögliche Anwendungsbereich dieser Methoden erstreckt sich dennoch von Simulationen mit Feststoffen wie der Verbrennung von Kohle und der Bildung von Ruß [101], sowie Simulationen von Wirbelschichten [5] über Simulationen von Hubkolbenmotoren unter dem Aspekt eines beweglichen Rechengebiets und der Verdampfung des Sprays [67], sowie der Beschreibung von Verteilungsfunktionen im Rahmen von reaktiven Simulationen mit tabellierter Chemie [6]. Einen weiteren interessanten Aspekt der Momenten-

methoden stellt v. A. aus mathematischer Sicht die Modellierung sich kreuzender Tropfentrajektoren, dem sog. *Particle Trajectory Crossing* (PTC), dar [22].

1.3 Zielsetzung der Arbeit

Zielsetzung dieser Arbeit ist die Entwicklung und Bereitstellung eines industriell anwendbaren, numerischen Gesamtverfahrens für die Berechnung reaktiver Mehrphasenströmungen im Rahmen von technischen Verbrennungssystemen.

Basierend auf den vielversprechenden Arbeiten im Bereich der Modellierung von Massen- und Wärmetransferprozessen für polydisperse, nicht-reaktive Konfigurationen der Sydney-Konfiguration stellt diese Arbeit die konsequente thematische Fortsetzung, bedingt durch die Kopplung mit einem Verbrennungsmodell, für reaktive Konfigurationen dar. Der Fokus liegt hierbei auf der akkuraten Beschreibung hervorhebender Aspekte wie der Massen- und Wärmetransferprozesse und der Gemischbildung, sowie des chemischen Umsatzes des Brennstoffs. Die Modellierung des Sprays basiert auf Basis der Williams-Spray-Gleichung, die wiederum die Grundlage der eulerbasierten Momentenmethode, der DQbSMoM, bildet. Die DQbSMoM stellt eine sektionsbasierte Formulierung der Momentenmethode dar, wobei eine Aufteilung der Verteilungsfunktion innerhalb der Sektionen vorgenommen wird. Zur Simulation wurde eine bereits am Fachgebiet EKT bestehende Momentenmethode weiterentwickelt und mit einem tabellenbasierten Modell zur Beschreibung der chemischen Reaktionen gekoppelt. Durch die Kopplung der DQbSMoM mit dem *Flamelet Generated Manifold* (FGM)-Ansatz sind Wechselwirkungen, wie z. B. der umgebungstemperaturbedingte Anstieg von Massen- und Wärmetransferprozessen innerhalb der dispersen Phase, zu berücksichtigen. Die Verifizierung und Validierung erfolgt im Rahmen eines polydispersen reaktiven Sprays. Die erzielten numerischen Resultate werden mit experimentellen Resultaten von drei ausgewählten Konfigurationen sog. Sydney-Spray-Brenners für flüssige Brennstoffe unter atmosphärischen Umgebungsbedingungen verglichen.

Den Rahmen dieser Arbeit bildet der *Computational Fluid Dynamics* (CFD)-Code *PreciseUNS* von *Rolls-Royce Deutschland*. Der Code basiert auf der Finiten-Volumen-Methode für strukturierte und unstrukturierte Rechengitter, unter Berücksichtigung von sowohl kompressiblen als auch inkompressiblen Strömungen. Die Entwicklung von *PreciseUNS* wird von *Rolls-Royce Deutschland* und Partner-Universitäten, darunter auch der *Technische Universität Darmstadt*, voran getrieben.

1.4 Gliederung der Arbeit

Vorliegende Dissertation ist in sieben Kapitel unterteilt, wobei Kapitel 1 die Einleitung darstellt. Kap. 2 beinhaltet die Bilanzgleichungen für die Modellierung ein- und mehrphasiger Fluide. Hierbei werden die Formulierungen der Erhaltungs- und Transportgleichungen, sowie die Modellierung der Turbulenz für die kontinuierliche und die disperse Phasen vorgestellt. Vor dem Hintergrund der Behandlung mehrphasiger Strömungen werden grundlegende Klassifizierungsansätze, bestehende Modellierungsansätze und die zur Verfügung stehenden Mittelungsstrategien für eine Simulation diskutiert. Der Aspekt der Interaktion zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase wird im Abschnitt 2.2.5 beschrieben.

Die auf der Beschreibung mehrphasiger Fluide aufbauenden Momentenmethoden werden in Kap. 3 eingeführt. Es folgt eine Beschreibung der DQMoM und hierauf aufbauenden sektionalen Formulierung der DQbSMoM. Im Rahmen der DQbSMoM wird das Splitting der Operatoren und die Vorstellung allgemeiner Lösungsstrategien für den Transport im physikalischen und im phasenbasierten Raum vorgestellt. Dieses Kapitel beinhaltet ebenfalls Modellierungsansätze für die auf einen Tropfen wirkenden Kräfte im physikalischen Raum, sowie die angewendeten Modelle zur Beschreibung der Massen- und Wärmetransferprozesse anhand eines Gleichgewichts- und eines Nichtgleichgewichtsmodell, sowie die Strategie zur Modellierung der Koaleszens von Tropfen.

Die zur Beschreibung reaktiver Strömungen erforderliche Reaktionskinetik, sowie die Herleitung der reaktionsbedingten Quellterme mithilfe des Arrhenius-Ansatzes sind Kap. 4 zu entnehmen. In diesem Kapitel werden auch die Verbrennungsregime – nicht-vorgemischte und vorgemischte Verbrennung für homogene System, hervorhebenswerte Aspekte der Sprayverbrennung für heterogene Systeme – eingeführt. Weiterhin werden die im Rahmen dieser Dissertation behandelte Verbrennungsmodelle, namentlich das *Eddy-Break-Up*, und das *Flamelet-Generated-Manifold*-Modell, mithilfe ihrer charakteristischen Gleichung und den jeweiligen Eigenschaften vorgestellt. Die Kopplung zwischen der DQbSMoM und dem Verbrennungsmodell, unter der Berücksichtigung neuer Ansätze, wird in Abschnitt 4.4 beschrieben. Die neuen Ansätze beinhalten hierbei die Implementierung eines dynamischen Subiteration und eines adaptierten Momentenvektors.

In Kap. 5 wird die zugrunde liegende Finite-Volumen-Methode, die Generierung des Rechengitters, sowie die Diskretisierungsansätze für die Erhaltungs- und Transportgleichungen erläutert. Ferner werden iterative Lösungsverfahren für gekoppelte, nicht-lineare Systeme und das numerische Gesamtverfahren unter Berücksichtigung der Erhaltung der Masse der Phasen, der Korrektur des Drucks im Rechenggebiet und des detailliert beschriebenen *operator-splitting*-Ansatzes, vorgestellt.

Die Verifizierung und Validierung der Implementierung wird in Kap. 6 anhand von drei Konfigurationen – im Folgenden als AcF1, AcF2 und AcF3 bezeichnet – eines reaktiven Spray-Brenners vorgestellt. Der Beschreibung des experimentellen und numerischen Aufbaus folgt ein Vergleich der numerische Resultate der Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3 mit den entsprechenden experimentellen Resultaten. Das Kapitel endet mit einer Schlussfolgerung und Bewertung der erzielten numerischen Resultate.

Den Abschluss dieser Arbeit bildet Kapitel 7 mit einer Zusammenfassung, sowie einem Ausblick für zukünftige Arbeiten im Bereich der Simulation reaktiver Mehrphasenströmungen mit Momentenmethoden.

2 Grundlagen der Fluid-Modellierung

Nachfolgendes Kapitel beinhaltet die Grundlagen der Modellierung ein- und mehrphasiger Fluidströmungen und weist dementsprechend eine zweigeteilte Struktur auf. Im ersten Unterkapitel 2.1 werden die allgemeinen Transportgleichungen der Masse, des Impulses, der Enthalpie und eines Skalars für einphasige Systeme vorgestellt. Desweiteren werden Aspekte der Modellierung turbulenter Strukturen in Kap. 2.2.6, und das in dieser Arbeit angewendete k - ε -Modell zur Beschreibung vorgestellt. Im zweiten Unterkapitel 2.2 werden, ausgehend von den genannten Transportgleichungen einphasiger Systeme, Formulierungen der Transportgleichungen für mehrphasige Systeme vorgestellt. Ausgehend von einer allgemeinen Strategie zur Klassifizierung mehrphasiger Strömungen werden in Kap. 2.2.2 zwei gängige Modellierungsansätze – der sog. Euler-Lagrange-, und der Euler-Euler-Ansatz –, sowie die Mittelungsmethoden vorgestellt. Die angewendeten Methoden zur Modellierung des Impulsaustauschs zwischen den vorliegenden Phasen sind in Kap. 2.2.5 aufgeführt. Der Einfluss turbulenter Strukturen der kontinuierlichen Phase auf die disperse Phase wird in Kap. 2.2.6 anhand des Ansatzes von Simonin und Viollet vorgestellt.

2.1 Modellierung einphasiger Fluide

Die der Modellierung einphasiger Fluide zugrunde liegenden Erhaltungsgleichungen ergeben sich aus physikalischen Gesetzen und werden auf ein vom Fluid durchströmtes Kontrollvolumen (KV) (siehe Kap. 5) mit der Oberfläche S und dem Volumen V für die im Fokus des Interesses liegende, zu berechnende Variable angewendet. Jeder Oberfläche wird hierzu ein Normalvektor n_i zugeordnet. Bei Transportgleichungen hingegen sind im Vergleich zu Erhaltungsgleichungen zusätzlich sogenannte Quell- und/oder Senkenterme zu berücksichtigen. Die Erhaltungs- und Transportgleichungen sind, bedingt durch die Komplexität realer Konfigurationen, selten analytisch lösbar und werden mit den in Kapitel 5 beschriebenen numerischen Methoden gelöst. Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Enthalpie, sowie die Transportgleichung eines Skalars, z. B. einer Komponentenspezies oder der im Falle von Verdampfung relevanten Dampfbeladung der Gasphase Y_{fuel} , sind mathematisch betrachtet nichtlineare, gekoppelte Differentialgleichungen. Bei den im Rahmen der Gleichungen verwendeten Indizes gilt die Einsteinsche Summenkonvention. Zur besseren Übersichtlichkeit werden jeweils die differentiellen Formen der Erhaltungs- und Transportgleichungen beschrieben, in Kapitel 5 werden die numerischen Methoden zur Diskretisierung der Gleichungen vorgestellt.

Das Fluid wird, wie im vorliegenden Fall, als inkompressibel betrachtet, da die Mach-Zahl $Ma < 0,3$ ist. Die Mach-Zahl wird mit dem Quotienten aus Fluidgeschwindigkeit u und Schallgeschwindigkeit a – ca. 343 m/s in Luft bei Raumtemperatur – bestimmt [113].

2.1.1 Erhaltungsgleichung der Masse

Der Massenerhaltungssatz besagt, dass die zeitliche Änderung der Masse pro Zeiteinheit innerhalb eines infinitesimal kleinen Volumens, als Kontrollvolumen bezeichnet, der Differenz der Massenzu- und -abnahme über die Oberfläche eines KV entspricht:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (2.1)$$

Basierend auf der Annahme konstanter Dichte, was gleichbedeutend mit der erwähnten Inkompressibilität eines Fluids ist, folgt $\partial \rho / \partial t = 0$. Hieraus lässt sich die sog. »Kontinuitätsgleichung« ableiten [123]:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (2.2)$$

Die Kontinuitätsgleichung findet Anwendung in einer Vielzahl numerischer Problemstellungen. Im Vergleich zu den nachfolgend vorgestellten Erhaltungsgleichungen des Impulses und der Enthalpie enthält obige Gleichung keinen Term des Drucks p . Aus diesem Grund werden bei numerischen Simulationen sog. »Druckkorrekturverfahren« angewendet, anhand derer sichergestellt wird, dass sowohl die Kontinuitätsgleichung, als auch die Erhaltungsgleichung des Impulses und der Enthalpie erfüllt werden und ein konvergentes Gesamtergebnis vorliegt. Das im Rahmen dieser Arbeit angewendete Druckkorrekturverfahren wird in Kap. 5.3.2 erläutert.

2.1.2 Erhaltungsgleichung des Impulses

Die Erhaltungsgleichung des Impulses beschreibt die zeitliche Änderung des Impulses eines Fluidelements entsprechend der auf das Fluid wirkenden Kräfte. Die Kräfte werden hierbei in Oberflächen- und Volumenkräfte unterteilt, für die Impulserhaltung folgt hieraus:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho g_j, \quad (2.3)$$

wobei der erste Term der *Right Hand Side* (RHS) die partielle Ableitung des Drucks p beschreibt, eine zu den Oberflächenkräften zählende Kraft. Der viskose Tensor τ_{ij} steht für den Spannungstensor und der Term ρg_j beschreibt die auf ein Fluid wirkenden weiteren Kräfte. Der viskose Tensor τ_{ij} , auch als Cauchyscher Spannungstensors bezeichnet, beschreibt den Spannungszustand aufgrund der Viskosität des Fluids. Durch die Angabe der Materialgleichung, also eines Zusammenhangs zwischen der Schergeschwindigkeit und den Scherspannungen, wird die Cauchysche Bewegungsgleichung spezialisiert zu einer Bewegungsgleichung für das betrachtete Material. Für, wie im vorliegenden Fall, Newtonsche Fluide sind beide Größen proportional zueinander:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (2.4)$$

Im Falle $i = j$ spricht man von orthogonal zur Oberfläche eines KV wirkenden Normalspannungskomponenten, $i \neq j$ hingegen bezeichnet die parallel zur Oberfläche wirkenden Schubspannungskomponenten. Da der Tensor symmetrisch ist, ergeben sich sechs voneinander unabhängige Variablen. Durch Annahme eines inkompressiblen Fluids vereinfacht sich der Tensor (2.4) zu:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (2.5)$$

woraus für Gleichung (2.6), unter Annahme konstanter Viskosität, sowie unter Anwendung der Kontinuitätsgleichung (2.2) folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i^2} + \rho g_j. \quad (2.6)$$

Der z. B. auf diesem Erhaltungssatz basierende Drehimpulssatz, sowie der beschleunigte Impulssatz werden bei Spurk et al. [123] vorgestellt.

2.1.3 Erhaltungsgleichung der Enthalpie

Zur Herleitung der Erhaltungsgleichung der Enthalpie h , welche insbesondere bei der Berechnung von Turbomaschinen von Relevanz ist, sind einige Zwischenschritte notwendig. Zur detaillierten Herleitung ist an dieser Stelle auf Spurk u. Aksel [123] verwiesen. Die zeitliche Änderung der totalen Energie e_t eines Fluides wird anhand der Differenz aus zugeführter und abgeführter Energie, sowie der am Fluid geleisteten Arbeit berechnet:

$$e_t = e + \frac{1}{2}u_i^2, \text{ bzw. } h_t = e_t + p v = e_t + \frac{p}{\rho}. \quad (2.7)$$

Die innere Energie wird hierbei durch die Variable e beschrieben. Hieraus folgt die Erhaltungsgleichung für die totale Energie e_t :

$$\rho \frac{\partial e_t}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial e_t}{\partial x_i} = -\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial x_i} + q_{\text{str}} - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i p) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \tau_{ij}) + \rho u_i g_i, \quad (2.8)$$

der erste Term der RHS beschreibt die Diffusion ε_i (siehe Gl. (2.11) und Gl. (2.12)) und q_{str} die zu- oder abgeführte Energie durch Strahlung. Der Tensor τ_{ij} beschreibt molekulare Kräfte aufgrund von Reibung, die letzten beiden Terme stehen für die Druck- und Massenkkräfte. Aus Gleichungen (2.7) und (2.8) folgt für die totale Enthalpie h_t :

$$\rho \frac{\partial h_t}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial h_t}{\partial x_i} = -\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial x_i} + q_{\text{str}} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i \tau_{ij}) + \rho u_i g_i, \quad (2.9)$$

wobei zur Herleitung der Enthalpie h die Erhaltungsgleichung der kinetischen Energie $u_i^2/2$ benötigt wird. Die kinetische Energie geht aus der Multiplikation der Impulserhaltungsgleichung mit der Geschwindigkeit u_i hervor und lautet:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} u_i^2 \right) + \rho u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} u_i^2 \right) = -u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho u_i g_i - u_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2.10)$$

Die Enthalpie h entspricht der totalen Enthalpie abzüglich der kinetischen Energie. Eine Subtraktion von Gleichung (2.9) und (2.10) führt auf folgende Erhaltungsgleichung:

$$\left(\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) - \left(\rho \frac{\partial p}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) = -\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial x_i} + q_{\text{str}} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (2.11)$$

Die Diffusion ε_i in Gl. (2.11) setzt sich hierbei aus drei Beiträgen zusammen:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^T + \varepsilon_i^M + \varepsilon_i^D. \quad (2.12)$$

Der Enthalpietransport ε_i^T wird hierbei durch das Fouriersche Gesetz der Wärmeleitung beschrieben. Der Enthalpietransport ε_i^M aufgrund von Massendifusionsvorgängen, gekennzeichnet durch den Diffusionskoeffizienten $j_{\xi i}$ einer Komponente ξ mit der Enthalpie h_ξ , wird mit folgender Gleichung berechnet:

$$\varepsilon_i^T = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}, \text{ und } \varepsilon_i^M = \sum_{\xi=1}^n h_\xi j_{\xi i}. \quad (2.13)$$

Die thermisch bedingte Diffusion ε_i^D , als Dufour-Effekt bezeichnet, spielt insbesondere bei kleinen Molekülen eine Rolle, wird jedoch im Rahmen von Verdampfungs- und Verbrennungsprozessen zumeist vernachlässigt.

2.1.4 Transportgleichung eines Skalars

Zusätzlich zu den Erhaltungsgleichungen der Masse, des Impulses und der Enthalpie können Transportgleichungen für beliebige strömungsrelevante Skalare Y_ξ definiert werden. Diese Transportgleichungen sind u. A. mathematisch dadurch gekennzeichnet, dass sie durch die Angabe eines richtungsunabhängigen reellen Zahlenwerts definiert sind. Eine allgemein gültige Form der Transportgleichung ist in Gl. (2.14) dargestellt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\xi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_\xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_\xi \frac{\partial Y_\xi}{\partial x_i} \right) + S_\xi. \quad (2.14)$$

Der erste Term obiger Gleichung beschreibt die zeitliche Änderung von Y_ξ , die nachfolgenden den konvektiven Transport mit der Strömungsgeschwindigkeit u_i , sowie die Diffusion mit einem, dem Skalar entsprechenden, Diffusionskoeffizienten D_ξ . S_ξ repräsentiert einen Quellterm. Insbesondere bei reaktiven Strömungen mit mehreren Komponenten sind diese Transportgleichungen von Relevanz.

In Mischungsprozessen ist insbesondere die räumliche und zeitliche Entwicklung, bzw. Verteilung einer beteiligten Spezies k von Interesse. Eine Spezies k wird hierbei mithilfe des Speziesmassenbruch Y_k – Masse der Spezies k bezogen auf die Gesamtmasse (siehe Gl. (2.15)) – angegeben:

$$Y_k = \frac{m_k}{m}. \quad (2.15)$$

Setzt man Gleichung 2.15 in Gleichung (2.14) ein, ergibt sich somit folgender Ausdruck:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(J_j^k(Y_k) \right) + \dot{\omega}_k. \quad (2.16)$$

J_j^k gibt hierbei die speziesabhängigen, diffusiven Flüsse an, und $\dot{\omega}_k$ repräsentiert einen Quellterm, z. B. infolge von Massentransferprozessen oder reaktiven Prozessen. Zur Lösung der Transportgleichung müssen die diffusiven Flüsse J_j^k über die Oberfläche des Kontrollvolumens bestimmt werden. Hierbei findet das sog. Ficksche Gesetz Anwendung; Die Teilchenstromdichte macht eine quantitative Aussage über die im statistischen Mittel gerichtete Bewegung von Teilchen, d. h. wie viele Teilchen einer Spezies sich pro Zeitschritt durch die Oberfläche eines Kontrollvolumens bewegen:

$$J_j^k = \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}. \quad (2.17)$$

D_k steht für den binären Diffusionskoeffizient der Spezies k , die diffusive Bewegung ist hierbei senkrecht zur Oberfläche ausgerichtet. Zusätzlich zu dem diffusiven Fluss (Gl. (2.17)) kann die Diffusionsgeschwindigkeit, ebenfalls nach dem Fickschen Gesetz und unter Zuhilfenahme des binären Diffusionskoeffizienten, bestimmt werden:

$$V_{j,k} Y_k = -D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}. \quad (2.18)$$

Setzt man den Diffusionskoeffizienten D_k mit der Viskosität der Strömung ins Verhältnis, führt dies auf den Ausdruck der dimensionslosen Schmidt-Zahl Sc_k . Die Schmidt-Zahl gibt dabei das Verhältnis von diffusivem Impuls- zu diffusivem Stofftransport an, und ist wie folgt definiert:

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} = \frac{\mu}{\rho D_k}. \quad (2.19)$$

Für $Sc_k > 1$ spricht man von einem dominanten Impulstransport, für $Sc < 1$ von einem dominanten Stofftransport. Ein Einsetzen von Gl. (2.19) in Gl. (2.16) ergibt eine Transportgleichung für den Speziesmassenbruch, die häufig bei der Verbrennungsmodellierung Anwendung findet:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc_k} \frac{\partial}{\partial x_j} (Y_k) \right) + \dot{\omega}_k. \quad (2.20)$$

In der Verbrennungsmodellierung ist es üblich, den Diffusionskoeffizienten mithilfe der Lewis-Zahl Le anzugeben, die das Verhältnis von thermischer Wärmeleitung zu Speziesdiffusion beschreibt:

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k}. \quad (2.21)$$

Eine Anwendung dieser Formulierung der Lewis-Zahl (2.21) auf Gl. (2.16) führt auf folgende Gleichung (2.22):

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda_t}{c_p} Le_k \frac{\partial}{\partial x_j} (Y_k) \right) + \dot{\omega}_k, \quad (2.22)$$

wobei λ die Temperaturleitfähigkeit angibt. Mit Gleichung (2.22) wird z. B. die, im Rahmen der Modellierung des Massen- und Wärmetransfers und der Verbrennungsmodellierung relevante, Masse des verdampften Brennstoff Y_∞ berechnet.

2.1.5 Modellierung der Turbulenz

Strömungsvorgänge sind in praktischen Anwendungen zumeist turbulent, eine direkte Berechnung der physikalischen Transportgrößen ist in praxisnahen Aufgabenstellungen aufgrund der zur Verfügung stehenden Rechenkapazität und des zeitlichen Aufwands bei komplexen, bzw. großräumigen Problemstellungen eher unüblich. Hauptmerkmale der Turbulenz sind unter anderem die stochastische Schwankung in Raum und Zeit, d. h. dreidimensionale Instationaritäten, die mit einer stärkeren Durchmischung der physikalischen Erhaltungsgrößen einhergehen. Turbulente Strukturen entstehen in Abhängigkeit der mittleren Strömungsgeschwindigkeit. Der Energietransfer erfolgt von den größeren turbulenten Strukturen zu den kleineren, bis zur Dissipation auf molekularer Ebene aufgrund der Viskosität. Die Reynolds-Zahl einer turbulenten Strömung übersteigt jeweils eine problemspezifische, kritische Reynolds-Zahl, im Falle einer Rohrströmung ist diese z. B. $Re \geq 2300$; Der Charakter der Strömung schlägt von laminar zu turbulent um.

Eine Dimensionsanalyse, basierend auf der Annahme, dass die Bewegung der kleinsten Wirbel lediglich von der Dissipationsrate ε und der kinematischen Viskosität ν beeinflusst wird, führt auf Formulierungen für das kleinstmögliche Längenmaß η , das kleinstmögliche Zeitmaß τ_η und das ebenfalls kleinstmögliche Geschwindigkeitsmaß v_η :

$$\eta \approx \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad \tau_\eta \approx \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad \text{und} \quad v_\eta \approx (\nu \varepsilon)^{1/4}. \quad (2.23)$$

Diese sog. Kolmogorovsche Skalen sind Bestandteil der Energiekaskade, die die Dissipation von Energie in ungeordnete Molekularbewegungen beschreibt. Für die in der Gesamtheit aller Wirbelbewegungen gespeicherte Energie k gilt:

$$E = \int_0^\infty E(\kappa) d\kappa. \quad (2.24)$$

Eine graphische Auftragung des Energiespektrum $E(\kappa)$ über die Wellenzahl κ führt auf die Energiekaskade (siehe Abb. 2.1). Die Wellenzahl κ entspricht hierbei $\kappa = 2\pi/l$ und repräsentiert die räumliche Abmessungen der Wirbelstrukturen. Die Energiekaskade wiederum stellt den Energietransfer von größeren auf kleinere Wirbel unter Zunahme der Entropie dar.

In dem mit »A« bezeichneten Bereich, dem Bereich der größeren Strukturen, wird die Bildung aus der Hauptströmung beschrieben, Dissipationseffekte spielen eine tendentiell eher untergeordnete Rolle. Dieser Bereich wird auch als Produktions- oder Injektionsbereich bezeichnet. Bereich »B« kennzeichnet die Zufuhr von Energie aus der Strömung, die turbulenten Strukturen liegen in der Größenordnung des integralen Längenmaßes l_{int} . Die Wirbel kleinerer Wellenzahlen beinhalten hierbei den überwiegenden Anteil der turbulenten kinetischen Energie.

Im Gegensatz zum Produktionsbereich entstehen im sogenannten Trägheitsbereich »C« keine neuen Wirbel direkt aus dem Spannungspotenzial der gemittelten Hauptströmung. Die Energie, die in der Bewegung steckt, wird durch die Impulserhaltung von größere auf kleinere Wirbel übertragen. Auch in diesem Bereich spielen Dissipationseffekte nur eine untergeordnete Rolle. Die Abnahme im Trägheitsbereich kann mit $k^{-5/3}$ approximiert werden. Der Dissipationsbereich »D« ist durch einen sehr schnellen Zerfall der Wirbel gekennzeichnet, die in der Größenordnung des kleinsten Längenmaßes η liegen. Die Dissipation ε der Turbulenzenergie erfolgt durch molekulare Reibungskräfte – dieser Bereich wird oftmals auch als viskoser Bereich bezeichnet. In diesem Bereich nehmen die viskosen Spannungen aufgrund der steigenden Geschwindigkeitsgradienten innerhalb der Wirbel stark zu und wirken der Wirbelbewegung entgegen.

Eine Modellierungsstrategie zur Darstellung turbulenter Strukturen ist nach Schäfer [114] die zeitliche Mittelung der Geschwindigkeit und eines Skalars gemäß Reynolds in einen Mittelwert \bar{u}_i , sowie die entsprechende Fluktuation u'_i :

$$u_i(x, t) = \bar{u}_i(x, t) + u'_i(x, t). \quad (2.25)$$

Dieser Ansatz gilt hierbei sowohl für eine beliebige skalare Größe φ , als auch für den Druck p :

$$\varphi_i(x, t) = \bar{\varphi}_i(x, t) + \varphi'_i(x, t) \quad , \text{ und } \quad p(x, t) = \bar{p}(x, t) + p'(x, t). \quad (2.26)$$

Durch Einsetzen obigen Ansatzes nach Reynolds zur Zerlegung der Geschwindigkeit in die Erhaltungs- und Transportgleichungen wird am Beispiel der Impulserhaltungsgleichung (2.6) die Herleitung des

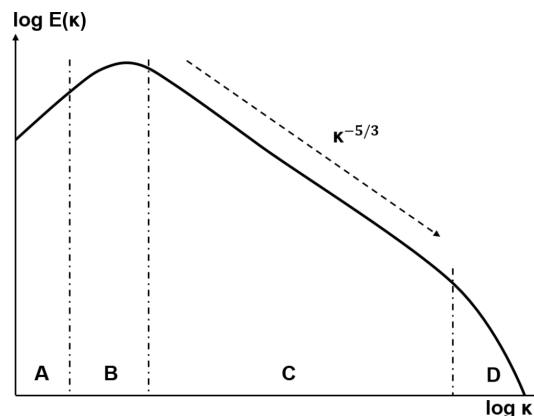


Abbildung 2.1: Schematische Abbildung des Energiespektrums einer turbulenten Strömung, dargestellt in einer logarithmischen Skala mit der Unterteilung in den Produktions-, den Trägheits-, sowie den Dissipationsbereich, nach [73, 114].

Reynolds-Spannungstensors beschrieben. Bei Vernachlässigung des Druckgradienten und des Einflusses externer Kräfte folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \quad (2.27)$$

Durch Einsetzen des Reynolds-Ansatzes für die Geschwindigkeit u_i in Gl. (2.27) folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho(\bar{u}_i + u_i')) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho(\bar{u}_i + u_i')(\bar{u}_j + u_j')) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{u}_i + u_i') \right). \quad (2.28)$$

Exemplarisch für den konvektiven Term auf der linken Seite ergibt sich durch Multiplikation:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho(\bar{u}_i + u_i')(\bar{u}_j + u_j')) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho(\bar{u}_i \bar{u}_j + u_i' \bar{u}_j + \bar{u}_i u_j' + u_i' u_j')). \quad (2.29)$$

Nach einer zeitlichen Mittelung und Anwendung obiger Mittelungsvorschriften vereinfacht sich die Impulserhaltungsgleichung zu folgendem Ausdruck:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho(\bar{u}_i \bar{u}_j + \overline{u_i' u_j'}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right), \quad (2.30)$$

wobei $\overline{u_i' u_j'}$ die unbekannten Reynolds-Spannungen beschreibt. Hieraus wird der Reynolds-Spannungstensor τ abgeleitet, der wie folgt definiert ist:

$$\tau = \rho \overline{u_i' u_j'}. \quad (2.31)$$

Durch Einsetzen des Ansatzes zur Zerlegung in einen Mittelwert und eine Schwankungsgröße in die Transportgleichungen der Masse (2.1), des Impulses (2.6) und eines Skalars (2.14) resultieren die sogenannten Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen der Masse (2.32), des Impulses (2.33), sowie eines beliebigen Skalars (2.34):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i) = 0, \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho g_j - \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \overline{u_i' u_j'}), \text{ und} \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\xi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i Y_\xi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_\xi \frac{\partial \bar{Y}_\xi}{\partial x_i} \right) + \bar{S}_\xi - \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \overline{u_i' Y_\xi'}). \quad (2.34)$$

Die gemittelten Erhaltungs- und Transportgleichungen weisen bis auf den Reynolds-Spannungs-Tensor τ_{ij} eine vergleichbare Struktur zu den ungemittelten Gleichungen auf. Das Ziel der Turbulenzmodellierung ist die Approximation des Reynolds-Spannungstensors τ_{ij} mithilfe geeigneter Ansätze aus den Erhaltungsgleichungen, bzw. aus vorhandenen Strömungsgrößen. In der Fachliteratur wird dies als »Schließungsproblem« bezeichnet. Da derart komplexe turbulente Strömungen in realitätsnahen Fragestellungen nicht mehr analytisch lösbar sind, werden die in Kap. 5 beschriebenen numerischen Verfahren angewendet. Im Rahmen dieser Verfahren wird das geometrische Abbild der zu simulierenden Geometrie in eine Vielzahl kleinerer Gebiete, den sog. Kontrollvolumen, zerlegt, innerhalb derer die gemittelten Gleichungen gelöst werden. Die Abstände innerhalb des Rechengitters bestimmen ein räumliches Längenmaß, bis zu dem die Strömung aufgelöst werden kann. Zur Schließung der unbekannten Terme stehen u. a. folgende Modellansätze zur Verfügung:

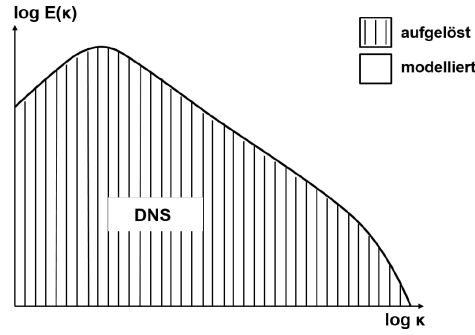


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des aufgelösten turbulenten kinetischen Energiespektrums im Rahmen einer DNS, nach [73].

Direkte Numerische Simulation – Die DNS stellt den Ansatz mit dem geringsten Modellierungsanteil zur Berechnung einer turbulenten Strömung dar. Das Rechengitter ist hierbei derart gestaltet, dass in weiten Teilen das Kolmogorowsche Längenmaß aufgelöst wird. Gleichung (2.32), Gleichung (2.33), sowie Gleichung (2.34) können ohne weitere vereinfachende Annahmen direkt numerisch gelöst werden. Die in Abb. 2.1 dargestellte Energiekaskade wird mit einer DNS vollständig, d. h. ohne Modelle aufgelöst, siehe Abb. 2.2. Die Anzahl an generierten Kontrollvolumen N_j je Raumrichtung j skaliert bei einer homogenen räumlichen Verteilung mit der Reynolds-Zahl der Strömung dabei wie folgt:

$$N_j \sim Re^{3/4}.$$

Unter Berücksichtigung einer ausreichenden Anzahl von Zeitschritten lässt sich zeigen, dass der Rechenaufwand einer DNS mit der Potenz der Reynolds-Zahl ansteigt. Daher bleibt die DNS derzeit beschränkt auf kleine Geometrien, quasi-analytische Konfigurationen, sowie auf Simulationen mit kleinen Reynolds-Zahlen. Der hohe Rechenaufwand ermöglicht die Anwendung einer DNS in industriellen Fragestellungen derzeit noch nicht. Jedoch können die mit einer DNS erhaltenen Ergebnisse – unter der Voraussetzung der Quantifizierung numerischer Fehler – als hinreichend exakt angesehen werden. Die erforderliche Messtechnik und der experimentelle Aufwand, um die transienten Strömungsgrößen dreidimensional zu vermessen, zeigen, dass die DNS eine Alternative zu Experimenten sein kann. Dies ist um so mehr der Fall, wenn man z. B. in einem Spray den Primärzerfall betrachtet – einen Vorgang, der bei Zerstäubungsprozessen mit experimentellen Untersuchungen nur unzureichend zugänglich ist.

Reynolds gemittelte Navier-Stokes Gleichungen – Sind die mittleren Strömungsgrößen als Ergebnis ausreichend, so können durch die Reynolds-Zerlegung der Variablen und einer anschließenden Mittelung die *Reynolds-averaged Navier-Stokes Equations* (RANS) Gleichungen aufgestellt werden. Bei der Reynolds-Zerlegung einer Größe ϕ wird diese in einen statistischen Mittelwert $\langle \phi \rangle$ und in eine Schwankungsgröße ϕ' aufgeteilt:

$$\phi = \langle \phi \rangle + \phi'.$$

Es gilt per definitionem, dass der Mittelwert der Schwankungsgröße Null ist $\langle \phi' \rangle = 0$. Die Mittelung kann in Form einer Ensemble-Mittelung oder einer zeitlichen Mittelung durchgeführt werden. Der Mittelwert bei der Ensemble-Mittelung ist definiert als Mittelwert über N Realisationen:

$$\langle \phi(x, t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \phi_m(x, t).$$

Folgende Rechenregeln sind bei der Mittelung nach Reynolds gültig:

$$\begin{aligned}\langle\langle\phi\rangle\rangle &= \langle\phi\rangle, & \langle\phi + \kappa\rangle &= \langle\phi\rangle + \langle\kappa\rangle, \\ \langle\langle\phi\rangle\kappa\rangle &= \langle\phi\rangle\langle\kappa\rangle, & \langle\Delta\phi\rangle &= \Delta\langle\phi\rangle, \\ \left\langle\frac{\partial\phi}{\partial t}\right\rangle &= \frac{\partial\langle\phi\rangle}{\partial t}.\end{aligned}$$

Die in Abb. 2.1 aufgeführte Energiekaskade wird mit einer RANS nur unvollständig, d. h. unter Anwendung von Modellen zur Beschreibung der Turbulenz, aufgelöst, siehe Abb. 2.3. Das wohl

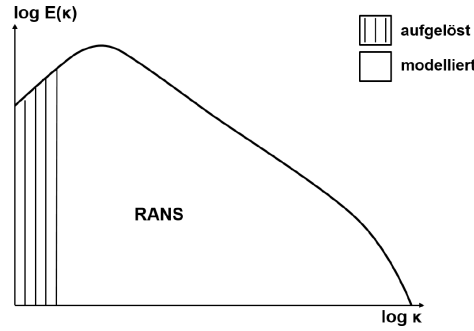


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des aufgelösten turbulenten kinetischen Energiespektrums im Rahmen einer RANS, nach [73].

bekannteste Turbulenzmodell ist das k - ε -Modell, das zur Gruppe der Wirbelviskositätsmodelle gehört und eine Beziehung der turbulenten Viskosität zur turbulenten kinetischen Energie k , sowie der Dissipationsrate ε der turbulenten kinetischen Energie herstellt. Die Schließung der unbekannten Terme erfolgt durch Lösung zusätzlicher Transportgleichung für k und ε . Die Kontrollvolumen müssen in diesen Fall derart räumlich im Rechengebiet verteilt sein, dass Gradienten der mittleren Strömung hinreichend akkurat aufgelöst werden. Bei geeigneter Modellauswahl kann im RANS-Kontext der Rechenaufwand durch ein gröberes Rechengitter gegenüber anderen Methoden reduziert werden.

Large-Eddy-Simulation – Die LES ist hinsichtlich des Rechen- und Modellierungsaufwands zwischen der DNS und RANS-basierten Simulationen einzuordnen. Das verwendete Rechengitter wird hierbei räumlich so fein gestaltet, dass das aufgelöste Skalenspektrum – der sog. Grobstrukturanteil – bis in den Trägheitsbereich hineinreicht. Da das Rechengitter jedoch nicht in der Lage ist, alle Skalen bis zur Dissipation aufzulösen, muss der Einfluss der nicht aufgelösten Skalen – der sog. Feinstrukturanteil – geeignet modelliert werden. Die in Abb. 2.1 abgebildete Energiekaskade wird mit einer LES zu ca. 80 % [98], d. h. unter Anwendung von Modellen zur Beschreibung der Turbulenz im Feinstrukturanteil, aufgelöst, siehe Abb. 2.4 . Um zwischen Grob- und Feinstruktur zu unterscheiden, wird eine Skalentrennung vorgenommen, die einer Tiefpassfilterung entspricht. In einer LES setzt sich eine Variable ϕ wie beschrieben aus einem Grob- und Feinstrukturanteil, $\bar{\phi}(x,t)$ und $\phi'(x,t)$, zusammen:

$$\phi(x,t) = \bar{\phi}(x,t) + \phi'(x,t),$$

wobei der Grobstrukturanteil durch unten stehende, räumlich und zeitlich Filteroperation über das Volumen V definiert ist:

$$\bar{\phi}(x,t) = \int_V \phi(x - x^*, t) G(x^*) dx^*.$$

Der verwendete Filter ist hierbei durch die Filterfunktion G definiert. Der Feinstruktur-Anteil wird modelliert, da dort kleinskalige Prozesse stattfinden, die durch das Rechengitter nicht aufgelöst

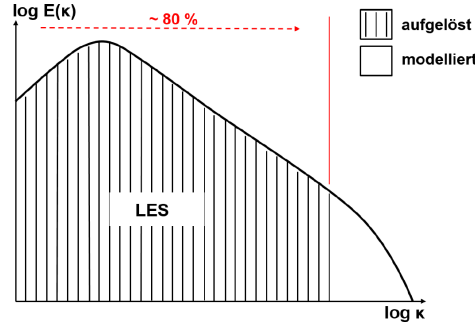


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung des aufgelösten turbulenten kinetischen Energiespektrums im Rahmen einer RANS, nach [73].

werden. Im Vergleich zur Modellierung der Reynolds-Spannungen im RANS-Kontext, ergeben sich jedoch für die Modellierung der Feinstrukturspannungen Vereinfachungen. Die zu modellierenden Effekte befinden sich innerhalb eines Skalenbereichs, für den eine gewisse Universalität angenommen werden kann. Dies hat zur Folge, dass Feinstrukturmodelle auf Strömungen mit unterschiedlichem Charakter angewandt werden können und gleichzeitig einfacher zu gestalten sind. Im Gegensatz zur Reynoldsschen Mittelwertbildung ist zu beachten, dass bei der Filterung folgende Rechenregeln gelten:

$$\bar{\bar{\phi}} \neq \bar{\phi} \quad , \quad \bar{\phi}' \neq 0 \quad , \quad \text{und} \quad \nabla \bar{\phi} \neq \nabla \bar{\phi} \quad .$$

Hinzu kommt, dass sich bei der Modellierung getroffene, vereinfachende Annahmen nicht allzu stark auf die numerischen Resultate der Hauptströmung auswirken, da mit geringer werdender Größe der turbulenten Strukturen der Einfluss auf die Strömung geringer wird.

Die Turbulenzmodellierung in folgender Arbeit basiert auf dem RANS-Ansatz, namentlich dem k - ε -Modell. Die turbulente kinetische Energie k wird hierbei durch Summation der Spur des Reynolds-Spannungstensors τ ermittelt. Der Definition der turbulenten kinetischen Energie k liegt die Annahme isotroper Turbulenz zugrunde, in diesem Fall sind lediglich die Hauptdiagonalen der Matrix besetzt:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} \quad . \quad (2.35)$$

Die Herleitung der Dissipation ε der turbulenten kinetischen Energie basiert auf analytischen Überlegungen. Eine Approximation der Geschwindigkeitskorrelation $\overline{u'_i u'_j}$ in Gl. (2.35) und somit des Reynolds-Spannungstensors ist für ein Newtonsches Fluid gegeben durch die Boussinesq-Approximation (Gl. (2.36)):

$$\overline{u'_i u'_j} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \frac{\mu^t}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad , \quad (2.36)$$

bzw. durch die Annahme der Inkompressibilität des Fluids vereinfacht sich der Ausdruck zu Gleichung (2.37):

$$\overline{u'_i u'_j} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \frac{\mu^t}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad . \quad (2.37)$$

Ausgehend von der Annahme, dass in laminaren Strömungen die Viskosität des Fluids die Energiedissipation dominiert, wird der Effekt der Turbulenz auf diesen Prozess durch eine erhöhte, turbulente Viskosität μ^t beschrieben [32]. Dies führt zu folgender Definition:

$$\mu^t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad . \quad (2.38)$$

Die Größe μ^t wird ebenfalls als turbulente Wirbelviskosität bezeichnet und basiert auf der Erhöhung der Viskosität durch turbulente Varianz u'_i der Geschwindigkeit, der Faktor C_μ gehört zu den empirisch ermittelten Standardparametern des k - ε -Modells und ist in Tabelle 2.1 zu finden. Gegenüber der laminaren Viskosität μ , die stoffspezifisch und temperaturabhängig ist, ist die turbulente Viskosität eine von der Turbulenzstruktur bestimmte, nicht physikalisch messbare Größe. Obige Annahmen, sowie Gleichung (2.35) und Gleichung (2.37) führen auf die eingangs erwähnte Erhaltungsgleichung der turbulenten kinetischen Energie k , auf deren Struktur im Folgenden detailliert eingegangen wird:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \overline{u_j} \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i u'_j} + \overline{p' u'_i} \delta_{ij} \right) - \rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \rho \mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}, \quad (2.39)$$

wobei diese Transportgleichung eine Korrelation höherer Ordnung $\overline{u'_i u'_i u'_j}$, sowie eine weitere unbekannte Korrelationen in Form des Druck-Transport-Terms $\overline{p' u'_i}$ aufweist. Diese Korrelationen werden durch zusätzliche Annahmen modelliert. Die Druck-Geschwindigkeitskorrelation ist gegenüber der Tripelgeschwindigkeitskorrelation vernachlässigbar, wobei die Tripelgeschwindigkeitskorrelation entsprechend dem Boussinesq-Ansatz approximiert wird durch:

$$\rho \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i u'_j} \gg \overline{p' u'_i}, \quad \text{und} \quad \rho \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i u'_j} \approx \frac{\mu^t}{\text{Pr}_k} \frac{\partial k}{\partial x_j}. \quad (2.40)$$

Pr_k bezeichnet hierbei die turbulente Prandtl-Zahl, deren Wert zumeist mit $\text{Pr}_k = 1$ angenommen wird. Die Dissipationsrate entstammt analytischen Überlegungen im Rahmen der Erhaltungsgleichung der turbulenten kinetischen Energie und ist proportional zu $k^{3/2}/L$. Liegt ein turbulentes Gleichgewicht der Produktions- und Dissipationsrate vor, kann die Dissipation ε anhand der kinetischen Energie der Turbulenz und dem turbulenten Längenmaß L abgeschätzt werden:

$$\varepsilon = \mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}. \quad (2.41)$$

Die Annahme eines turbulenten Gleichgewichts basiert auf der Energiekaskade. Die kinetische Energie wird von großskaligen turbulenten Strukturen hin zu den kleinsten Strukturen transportiert, innerhalb derer sie unter dem Einfluss der Viskosität in innere Energie dissipiert. G_k beschreibt die Produktion turbulenter kinetischer Energie aufgrund des Gradienten des Mittelwerts der Strömung, eine Modellierung ist über Gleichung (2.37) möglich:

$$G_k = -\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \approx \mu^t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}. \quad (2.42)$$

Zusätzlich zu den bereits vorgestellten Erhaltungs- und Transportgleichungen werden die kinetische Energie k und die Dissipation ε anhand zweier über das Prinzip der Energiekaskade [32] gekoppelter Erhaltungsgleichungen wie folgt berechnet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k \overline{u_i}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu^t}{\text{Pr}_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + G_k - \rho \varepsilon, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon \overline{u_i}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu^t}{\text{Pr}_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} G_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon). \quad (2.44)$$

Die RHS der Erhaltungsgleichung von k beinhaltet den, um die turbulente Viskosität erweiterten, Diffusionsterm, sowie den Produktions- und Dissipationsterm G_k , bzw. ε . In Tabelle 2.1 sind die allgemeinen Standardparameter dargestellt. Eine wesentliche Annahme bei diesem Modell ist die einer sogenannten »isotropen Turbulenz«. Die Annahme beinhaltet, dass die turbulenten Schubspannungen in allen Koordinatenrichtungen gleich groß sind.

Tabelle 2.1: Standardparameter des k - ε -Modells [135].

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	Pr_k	Pr_ε
0,09	1,44	1,92	1,00	1,30

Die turbulente Korrelation aus Geschwindigkeit und einem Skalar $\overline{u'_i \varphi'}$ wird wie folgt berechnet:

$$\overline{u'_i \varphi'} = -D^t \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial x_i}, \quad (2.45)$$

der turbulente Diffusionskoeffizient D^t entspricht hierbei:

$$D^t = \frac{\mu^t}{\rho Pr_t}, \quad \text{mit} \quad Pr_t = \frac{c_p \mu^t}{\lambda^t}. \quad (2.46)$$

Eine häufig genutzte Vereinfachung ist nach Ferziger u. Perić [32] $Pr = Pr_t \approx 1$. Diese Vereinfachung weist für turbulente Strömungen eine höhere Allgemeingültigkeit auf, als für laminare Strömungen, bei der ausschließlich molekulare Austauschvorgänge auftreten.

Aufgrund der vielen CFD-Simulationen, die mit diesem Turbulenzmodell durchgeführt wurden, sind die Stärken und Schwächen des k - ε -Modells hinreichend bekannt. Von Vorteil bei der Anwendung ist, dass die Implementierung zweier zusätzlicher Erhaltungsgleichungen vergleichsweise einfach ist und diese darüber hinausgehend eine vergleichbare Struktur aufweisen, wie die bereits vorgestellten Erhaltungsgleichungen. Das Modell ist insbesondere geeignet für die Berechnung von Strömungen in einem geometrisch simpleren Kontext, wie z. B. dem Kernbereich einer vollturbulenten Rohrströmung. Es wird ebenfalls häufig zur Analyse von technischen Strömungsprozessen genutzt, bei denen die globalen Strömungsstrukturen anhand der Mittelwerte im Fokus des Interesses liegen [113]. Als nachteilig hat sich erwiesen, dass das k - ε -Modell in komplexeren Strömungen mit Staupunkten, oder mit verdrallten Stromlinien, wie z. B. in Turbomaschinen, zu Ergebnissen mit beschränkter Aussagekraft führen kann. Da auf eine Modellierung der wandnahen Strömung zumeist nicht verzichtet werden kann – insbesondere die Impulsübertragung findet über Wände statt – werden sogenannte logarithmische Wandfunktionen oder spezielle *Low-Re*-Turbulenzmodelle genutzt [113, 114].

2.2 Modellierung mehrphasiger Fluide

Abgeleitet von den grundlegenden Erhaltungs- und Transportgleichungen zur Beschreibung von einphasigen Strömungen werden nachfolgend die zur Beschreibung eines zwei- oder mehrphasigen Spray-Systems angewendeten Gleichungen vorgestellt. Bei Betrachtung des Einspritzvorgangs von Brennstoff in die Brennkammer eines Triebwerks zum Beispiel ist feststellbar, dass durch eine Vielzahl physikalischer Phänomene wie der Zerstäubung des Brennstoffstrahls, sowie des Sekundärzerfalls des Brennstoffs, Tropfen unterschiedlichen Durchmessers – eine polydisperse Mehrphasenströmung – erzeugt wird. Zur Charakterisierung von polydisperse Mehrphasenströmungen werden Ansätze verwendet, die in diesem Unterkapitel vorgestellt werden. Entsprechend obiger Definition dient als Basis der Modellierungsstrategien eine Indikatorfunktion $\chi_p(x, t)$ für eine Phase mit dem Index p :

$$\chi_p(x, t) = \begin{cases} 1 & , \text{ wenn die Phase } p \text{ vorhanden ist,} \\ 0 & \text{ anderenfalls.} \end{cases} \quad (2.47)$$

Die Modellierung eines mehrphasigen Fluids basiert auf der einleitend vorgestellten Modellierung eines einphasigen Fluids. Mit der Modellierung eines mehrphasigen Systems sind zusätzliche Modellannahmen zur Beschreibung der Interaktion zwischen den Phasen verbunden. In einer Zwei- oder Mehrphasenströmung wird i. A. eine materiell verbundene Phase als kontinuierliche Phase, Index g , eine materiell nicht verbundene hingegen als disperse Phase mit dem Index d bezeichnet.

2.2.1 Klassifizierung mehrphasiger Fluide

Zur detaillierten Klassifizierung wird der Volumenanteil α_p einer Phase p angewendet :

$$\alpha_d = \frac{V_d}{V_{ges}} \quad \text{bzw.} \quad \alpha_g = \frac{V_g}{V_{ges}}, \quad (2.48)$$

wobei die Identität $\alpha_d + \alpha_g = 1$ zu beachten ist. Dem Volumenanteil der dispersen Phase α_d entsprechend kann eine Unterteilung des Spray-Regimes in die beiden Extrema »dünn« und »dicht« vorgenommen werden, wobei sich gemäß Elgobashi [29] die in Tabelle 2.2 dargestellten Kopplungsbedingungen ergeben.

Tabelle 2.2: Klassifizierung einer Zweiphasenströmung [29].

disperser Volumenanteil α_d			Bezeichnung	Kopplungsbedingung
	α_d	$< 5 \cdot 10^{-7}$	»dünn«	Ein-Weg-Kopplung
$5 \cdot 10^{-4} \geq$	α_d	$\geq 5 \cdot 10^{-7}$	»verdünnt«	Zwei-Wege-Kopplung
$5 \cdot 10^{-4} <$	α_d		»dicht«	Vier-Wege-Kopplung

Im Rahmen einer Ein-Weg-Kopplung in »dünnen« Spray-Regimen wird aufgrund der geringen Tropfenbeladung lediglich eine Beeinflussung der dispersen Phase durch die kontinuierliche Phase in Betracht gezogen. Mit steigender Tropfenbeladung kann eine Vernachlässigung des Einflusses der dispersen Phase auf die kontinuierliche Phase zu qualitativ schlechteren Ergebnissen führen. Aus diesem Grund ist eine Zwei-Wege-Kopplung zur Berücksichtigung der gegenseitigen Beeinflussung anzuwenden. Der Phasenwechselwirkung wird hierfür durch einen zusätzlichen Term bei der Impulserhaltungsgleichung Rechnung getragen. Eine Vier-Wege-Kopplung innerhalb »dichter« Spray-Regime berücksichtigt zusätzlich zu der gegenseitigen Beeinflussung die Tropfen-Tropfen-Interaktion anhand geeigneter Kollisionsmodelle. Relevant für die Kollisionsmodellierung z. B. ist der auf den Tropfendurchmesser d normierter Abstand L der Tropfen zueinander:

$$\frac{L}{d} = \left(\frac{\pi}{6 \alpha_d} \right)^{1/3}, \quad (2.49)$$

woraus im Rahmen von einfacheren deterministischen oder stochastischen Modellen z. B. die Kollisionswahrscheinlichkeit abgeschätzt oder Aussagen zur Dispersion der Tropfen stromab der Austrittsöffnung getroffen werden kann. Als ein weiteres, auf dem Volumenanteil α_d und der Dichte ρ_d der dispersen Phase, sowie der Dichte der kontinuierlichen Phase ρ_g basierendes Klassifikationsmerkmal für Zweiphasenströmungen gilt die Massenbeladung Z :

$$Z = \frac{\dot{m}_d}{\dot{m}_g} = \frac{\alpha_d \rho_d u_d}{(1 - \alpha_d) \rho_g u_g}, \quad (2.50)$$

deren praktischen Relevanz für die Beschreibung des Mischungsprozesses der beiden Phasen an dieser Stelle hervorhebenswert ist.

2.2.2 Modellierungsansätze

Zur Modellierung mehrphasiger Fluide stehen drei unterschiedlich detaillierte Methoden zur Auswahl – eine mikroskopische, eine mesoskopische und eine makroskopische Methode. Im Rahmen einer mikroskopischen Beschreibung werden Vorgänge detailliert auf molekularer Ebene, z. B. mit den Methoden der

DNS beschrieben. Aufgrund des hohen Rechenaufwands findet diese Methoden jedoch vornehmlich zur Verifizierung und Validierung weniger detaillierter Modelle Anwendung. Bei der makroskopischen Betrachtungsweise hingegen werden phasenbasierte Erhaltungs- und Transportgleichungen angewendet. Im Rahmen dieser Methode werden die bereits vorgestellten Gleichungen um die eingangs erwähnten Bilanzgleichungen (Kap. 2.1) zur Beschreibung des Impulsaustauschs erweitert und für jede Phase gelöst. Dieser Ansatz wird zumeist in Kombination mit einer Eulerschen Beschreibung der dispersen Phase angewendet. Als mesoskopische Betrachtungsweise wird der Übergang zwischen der detaillierten mikroskopischen und weniger detaillierten makroskopischen Beschreibung bezeichnet. Es werden hierbei sowohl globale Annahmen, als auch detaillierte Modellierungsansätze verwendet. Insbesondere im Rahmen komplexer, bzw. großer geometrischer Problemstellungen werden die beiden letztgenannten Methoden – sowohl im universitären Rahmen, als auch in kommerziellen Programmen – angewendet. Eine Übersicht der zur Verfügung stehenden Methoden, sowie eine quantitative Abschätzung des Aufwands ist Tabelle 2.3 nach [52] zu entnehmen. Eine detaillierte Erläuterung der aufgeführten Beschreibung »mikros-, makro- und mesoskopisch« ist in Abb. 3.3 dargestellt.

Tabelle 2.3: Modellierungsmethoden mehrphasiger Fluide nach [52].

Ansatz	Beschreibung	Rechenaufwand
DNS gekoppelt mit <i>DEM</i>	mikroskopisch	sehr hoch
Euler-Lagrange-Methode	mesoskopisch	hoch
Euler-Euler-Methode	meso- u. makroskopisch	mittel–gering

Die Prinzipien der Modellierung von Zweiphasensystemen werden detailliert von Crowe et al. [19] beschrieben, wobei im Folgenden auf die fundamentalen Modellierungsansätze zur Beschreibung der kontinuierlichen und dispersen Phasen eingegangen wird. Charakteristisch für eine Mehrphasen-Modellierung ist die Beschreibung der kontinuierlichen Phase mit einem ortsfesten Euler-basierten Ansatz, in dem die abhängigen Variablen als Funktionen von Raum und Zeit vorliegen, während zur Beschreibung der dispersen Phase zwei Betrachtungsweisen, der Lagrange-basierte und der Euler-basierte Ansatz, zur Verfügung stehen.

Euler-Lagrange-Ansatz – Im Rahmen des Euler-Lagrange-Ansatzes werden zwei unterschiedlich Betrachtungsweisen für die Phasen angewendet. Die kontinuierliche Phase wird mit den eingangs aufgeführten Erhaltungsgleichungen beschrieben. Für die Beschreibung der dispersen hingegen wird auf den Lagrange-Ansatz zurückgegriffen. Bei dieser materiellen Beschreibung werden die Bewegungsbahnen der Tropfen in einem sich mitbewegenden Koordinatensystem im Rechengebiet bestimmt. Für die numerischen Partikel werden die Trajektorien anhand der Erhaltungsgleichung des Impulses bestimmt. Die auf einen Tropfen einwirkenden Kräfte werden im Rahmen dieser Gleichung bilanziert und beschreiben somit die Änderung der Gleichung. Die Kräfte hängen u. A. von Strömungsgrößen der kontinuierlichen Phase, sowie den Eigenschaften des Tropfens, z. B. Durchmesser d , Dichte ρ_d und Geschwindigkeit $u_{i,d}$, ab. Durch diesen Ansatz sind zudem zu jedem Zeitpunkt die Positionen der Tropfen bekannt. Mit diesem Ansatz können zudem physikalische Phänomene, wie z. B. der sekundäre Tropfenzerfall, mit einem vergleichsweise geringen Mehraufwand berücksichtigt werden. Das Verfahren eignet sich für Problemstellungen mit geringerem Volumenanteil α_d der dispersen Phase, da mit steigendem Volumenanteil mehr Partikel betrachtet werden müssen und der Rechenaufwand, sowie die Rechenzeit ansteigt. Zur Reduktion des Rechenaufwands kann nicht die Trajektorie jedes Tropfens einzeln verfolgt werden, sondern mehrere Tropfen gleicher Eigenschaften zu sogenannten *Parcels* zusammengeschlossen werden. Aufgrund möglicher inhomogener Tropfenverteilungen im Rechengebiet lassen sich Lagrange-basierte Methoden, verglichen mit Euler-basierten, schlechter parallelisieren.

Euler-Euler-Ansatz – Demgegenüber werden bei Euler-basierten-Ansätzen die kontinuierliche und die disperse Phase als einander durchdringende Kontinua, mit jeweils eigenen Temperatur- und Geschwindigkeitsfeldern, betrachtet. Bedingt durch diese Eigenschaft wird der Ansatz auch als Multi-Fluid-Ansatz bezeichnet. Die Beschreibung erfolgt mit Differentialgleichungen vergleichbarer Struktur, die Interaktion zwischen den Phasen erfolgt über Quellterme in den Erhaltungs- und Transportgleichungen. Diese Eulersche Betrachtungsweise bietet den Vorteil, dass, aufgrund der gleichen Struktur des Gleichungssatzes, ein ähnlicher numerischer Lösungsansatz für die kontinuierliche und die disperse Phase verwendet werden kann, der wiederum in einem numerischen Gesamtverfahren mit guter Parallelisierbarkeit für beide Phasen resultiert. Desweiteren ist der Rechenaufwand unabhängig von dem Volumenanteil α_d , bzw. der Gesamtanzahl an betrachteten Tropfen, weshalb insbesondere bei hinreichend großer Tropfenbeladung eine Anwendung dieser Methode hinsichtlich der zu erwartenden Rechenzeit vorteilhaft ist. Nachteilig wirkt sich dies bezüglich jedoch bei detaillierterer Betrachtung die Tropfengrößenverteilung aus; Die Erhaltungs- und Transportgleichungen müssen jeweils für eine Klasse eines charakteristischen Längemaß aufgestellt und berechnet werden, was zu einer Verlängerung der Rechenzeit und des -aufwands führt. Zudem werden zusätzliche Modellierungsannahmen benötigt, wenn physikalische Effekte wie z. B. Verdampfung oder Tropfen-Tropfen-Interaktion eine dominierende Rolle spielen. Zusätzlich zu der Multi-Fluid-Methode basieren die, dieser Arbeit zugrundeliegenden Momentenmethoden (siehe Kapitel 3) ebenfalls auf dieser Betrachtungsweise. In den folgenden Unterkapiteln werden daher die zur Beschreibung im Rahmen der Multi-Fluid-Methode relevanten Gleichungen vorgestellt.

Die im Fokus dieser Arbeit stehenden Momentenmethoden basieren hierbei auf einer Euler-Euler-Beschreibung mit zwei Phasen, einer kontinuierlichen und einer dispersen Phase, und werden in Kap. 3 detailliert beschrieben.

2.2.3 Mittelungsmethoden

Zur Berechnung des Mittelwerts im Kontext von Mehrphasen-Strömungen stehen vier Mittelungsmethoden zur Auswahl. Bei einer Volumen-Mittelung wird eine Integration über ein definiertes Volumen Ω_V angewendet, eine Ensemble-Mittelung hingegen benötigt eine statistisch aussagekräftige Anzahl N von Messwerten, sog. »Ensembles«, zur Berechnung:

$$\text{Volumen-Mittelung :} \quad \langle \varphi \rangle_V = \frac{1}{\Omega_V} \int_{\Omega_V} \varphi \, dV, \quad (2.51)$$

$$\text{Ensemble-Mittelung :} \quad \langle \varphi \rangle_E = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \varphi_n, \quad (2.52)$$

$$\text{Zeitliche Mittelung :} \quad \langle \varphi \rangle_t = \frac{1}{\Omega_t} \int_{\Omega_t} \varphi \, dt = \bar{\varphi} \quad , \text{ und} \quad (2.53)$$

$$\text{Favre-Mittelung :} \quad \langle \varphi \rangle_F = \frac{\langle \alpha_p \rho_p \varphi_p \rangle_t}{\langle \alpha_p \rho_p \rangle_t} = \tilde{\varphi}. \quad (2.54)$$

Im Rahmen vorliegender Arbeit werden die beiden letztgenannten Mittelungsvarianten, jeweils mit den entsprechenden Zerlegungsansätzen, angewendet. Für die zeitlichen Mittelung sind folgende relevante Rechenvorschriften zu beachten:

$$\begin{aligned}\langle \phi \rangle_t &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \phi(x, t) dt = \langle \phi \rangle_t & \langle \phi' \rangle_t &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \phi'(x, t) dt = 0, \\ \langle \phi \rangle_t \langle \phi' \rangle_t &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \phi(x, t) \phi'(x, t) dt = 0 & , \langle \phi' \rangle_t \langle \phi' \rangle_t &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \phi'(x, t) \phi'(x, t) dt \neq 0.\end{aligned}$$

Eine detaillierte Beschreibung der Mittelungsmethoden findet sich u. a. bei Gerlinger [37]. Aus Konsistenzgründen mit der zitierten Literatur und um die Verwechslung mit verwendeten Indizes der Turbulenz zu vermeiden, werden zeitliche Mittelungen durch einen waagrechte Strich, z. B. $\langle u_i \rangle_t = \bar{u}_i$, gekennzeichnet. Die auf einer Mittelung anhand der Dichte basierende Favre-Mittelung ist durch eine Tilde, z. B. $\langle u_i \rangle_F = \tilde{u}_i$, gekennzeichnet.

2.2.4 Erhaltungs- und Transportgleichungen

In Anlehnung an obige Mittelungsmethoden ergibt sich somit für ein mehrphasiges Spray-System der Volumenanteil α_p , die materielle Dichte ρ_p und eine phasengemittelte Variable ϕ_p der Phase p für einen allgemeinen Mittelungsansatz:

$$\alpha_p = \langle \chi_p \rangle \quad , \quad \rho_p = \frac{\langle \chi_p \rho \rangle}{\langle \chi_p \rangle} \quad , \quad \text{und} \quad \phi_p = \frac{\langle \chi_p \rho \phi \rangle}{\langle \chi_p \rho \rangle}. \quad (2.55)$$

Dabei wird die Dichte einer Phase für den Verlauf der Berechnung als konstant angenommen, wodurch sich Vereinfachung $\alpha_p \phi_p = \langle \chi_p \phi \rangle$ ergibt. Desweiteren gilt für ein System mit N Phasen:

$$\sum_{p=1}^N \alpha_p = 1. \quad (2.56)$$

Die Erhaltungsgleichungen der Masse und des Impulses werden mit der Indikatorfunktion (2.47) multipliziert und anschließend mit den oben dargestellten Methoden über eine Phase p gemittelt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\alpha_p \rho_p u_{i,p}) &= S_{\alpha_p}, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p u_{j,p}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\alpha_p \rho_p u_{i,p} u_{j,p}) &= -\alpha_p \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_p (\tau_{ij,p} + \tau'_{ij,p}) \right) + M_{j,p} + \alpha_p \rho_g g_j + M_{j,p}^\alpha,\end{aligned} \quad (2.57)$$

wobei S_{α_p} den Quell- bzw. Senkenterm aufgrund des Phasenübergangs von disperser zu kontinuierlicher Phase beschreibt, $M_{j,p}$ die auf eine Phase p wirkenden Grenzflächenkräfte, wie z. B. der Widerstandskraft. Der Term $M_{j,p}^\alpha$ hingegen repräsentiert einen auf dem Massentransfer basierenden Quellterm. Der Term $\tau'_{ij,p}$ ähnelt in der Struktur dem Reynolds-Spannungsterm und resultiert aus den angewendeten Mittelungstechniken. Im Rahmen der DQBSMoM wird die Verdampfung der dispersen Phase jedoch nicht mit der Multi-Fluid-Methode, sondern über ein *operator-splitting*-Verfahren unter Anwendung der *Eulerian Multi-Size Moment* (EMSM)-Methode berechnet (siehe hierzu Kap. 3.2.4). Aus diesem Grund gilt im Folgenden $S_{\alpha_p} = M_{j,p}^\alpha = 0$ (siehe hierzu Kap. 3.2).

Im Rahmen der dieser Arbeit wird eine zweimalige Mittelung angewendet, in einem ersten Schritt wird eine Ensemble-Mittelung durchgeführt, im zweiten Schritt eine Favre-Mittelung, siehe Gleichungen (2.54). Die Variablen werden dementsprechend auch als sogenannte »Favre-Variablen« bezeichnet. Die zweimalige Mittelung der Gleichungen bietet sich aus drei Gründen an: eine zweifach gemittelte Erhaltungsgleichung der Masse enthält keinen der Varianz zuzuordnenden Term, die Struktur der Erhaltungsgleichung des Impulses enthält weniger zusätzlich zu bestimmende Terme und diese Formulierungen sind kompatibel mit der implementierten Modellierung der Turbulenz nach Simonin und Viollet (siehe Kapitel 2.2.5).

Die dichtegewichtete Mittelung nach Favre beruht auf der Zerlegung der Geschwindigkeit u_i – äquivalent zur zeitlichen Mittelung – auf folgendem Ansatz (2.59) zur Darstellung der Geschwindigkeit:

$$u(x,t) = \tilde{u}(x,t) + u''(x,t) \quad , \quad \text{mit} \quad \tilde{u}(x,t) = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}} . \quad (2.59)$$

Durch die Zerlegung ergibt sich ein Mittelwert \tilde{u} und ein fluktuierender Anteil u'' , wobei $\overline{u''} = 0$ und $\overline{\rho u''} \neq 0$ gilt [37]. Da in bereits gemittelten Transport- und Erhaltungsgleichungen Terme der Form $\overline{\rho u''}$ auftreten, reduziert eine Anwendung dieser Mittelung die Anzahl ungeschlossener Korrelationen. Von Vorteil bei der Anwendung ist die vergleichsweise einfache Kopplung mit Reynolds-gemittelten Größen, wobei, der Argumentation von Gerlinger [37] folgend, die Favre-Mittelung aus mathematischen Gesichtspunkten erfolgt und die getrennte Anwendung der Mittelungsansätze zu variierenden Ergebnissen führen kann.

Gemittelte phasenbezogene Erhaltungsgleichung der Masse

Die Vorteile einer Favre-Mittelung sollen anhand folgenden Beispiels verdeutlicht werden. Durch Einsetzen des Koeffizienten α_p in die Erhaltungsgleichung der Masse folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_p \bar{\alpha}_p) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_p \left(\overline{\alpha_p u_{i,p}} + \overline{\alpha'_p u'_{i,p}} \right) \right) = 0 . \quad (2.60)$$

Die Modellierung der Korrelation der Fluktuation des Volumenanteils und der Varianz $\overline{\alpha'_p u'_{i,p}}$ in Gl. (2.60) wird anhand folgender Beziehung vorgenommen:

$$\bar{\alpha}_p \tilde{u}_{i,p} = \overline{(\bar{\alpha}_p + \alpha'_p) (\bar{u}_{i,p} + u'_{i,p})} = \bar{\alpha}_p \bar{u}_{i,p} + \overline{\alpha'_p u'_{i,p}} . \quad (2.61)$$

Somit folgt für die gemittelte phasenbasierte Erhaltungsgleichung der Masse mit der einleitend beschriebenen Favre-Mittelung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_p \bar{\alpha}_p) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_p \bar{\alpha}_p \tilde{u}_{i,p}) = 0 . \quad (2.62)$$

Damit sind durch Anwendung einer zweifachen Mittelung keine zusätzlichen unbekannten Terme in der Gleichung vorhanden. Im weiteren werden die ebenfalls nach diesem Prinzip modifizierten Gleichungen vorgestellt.

Gemittelte phasenbezogene Erhaltungsgleichung des Impulses

Eine zeitliche und dichtebasierte Mittelung der Erhaltungsgleichung des Impulses für eine Phase p führt auf nachfolgende Formulierung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{\alpha}_p \tilde{u}_{j,p}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{\alpha}_p \tilde{u}_{i,p} \tilde{u}_{j,p}) = -\bar{\alpha}_p \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\alpha}_p (\tilde{\tau}_{ij,p} - \tilde{\tau}_{ij,p}^t) \right) + \rho_p \bar{\alpha}_p g_j + \bar{M}_{j,p} , \quad (2.63)$$

wobei eine Anwendung des Mittelungsansatzes auf den viskosen Tensor $\tau_{ij,p}$ zu dem folgenden Ausdruck führt:

$$\tilde{\tau}_{ij,p} = \mu_p \left(\frac{\partial \tilde{u}_{j,p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_{i,p}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_{k,p}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (2.64)$$

Der turbulente viskose Tensor $\tilde{\tau}_{ij,p}^t$ wird mittels der Boussinesq-Annahme (2.37) wie folgt modelliert:

$$\tilde{\tau}_{ij,p}^t = \rho_p \widetilde{u'_i u'_j} = \mu_p^t \left(\frac{\partial \tilde{u}_{j,p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_{i,p}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_{k,p}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \rho_p \frac{2}{3} k_p \delta_{ij}. \quad (2.65)$$

Zusätzlich sind weiterreichende Annahmen zum Impulstransport über die Phasengrenzflächen zwischen kontinuierlicher und disperser Phase anhand des Term $\bar{M}_{j,p}$ zu treffen.

Gemittelte Transportgleichung des Massenanteils Y_∞

Die Transportgleichung für den Massenanteil des verdampften Brennstoffs Y_∞ der Gasphase leitet sich aus Gleichung (2.14) ab, und ist für die Modellierung von reaktiven und nicht-reaktiven Mehrphasenströmungen unter Berücksichtigung von Massentransferprozessen relevant. Das Einbringen von tropfenförmigem Brennstoff in eine Gasphase führt aufgrund von Massen- und Wärmetransferprozessen zu einer Veränderung der Tropfentemperatur und des Tropfendurchmessers (siehe hierzu Kap. 3.2.4). Die Prozesse führen wiederum zu einer Erhöhung des Anteils an verdampftem Brennstoff innerhalb der Gasphase und können wie folgt ausgedrückt werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \bar{\alpha}_g \tilde{Y}_\infty) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_g \bar{\alpha}_g \tilde{u}_{i,g} \tilde{Y}_\infty) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_g \bar{\alpha}_g (D_\infty + \tilde{D}_\infty^t) \frac{\partial \tilde{Y}_\infty}{\partial x_i} \right) + S_\infty. \quad (2.66)$$

Der turbulenten Diffusionskoeffizienten $\tilde{D}_\infty^t = \mu_g^t / (\rho_g \text{Pr}^t)$ basiert hierbei auf der Viskosität und der Dichte der kontinuierlichen Phase, sowie der turbulenten Prandtl-Zahl Pr^t .

2.2.5 Modellierung des Impulsaustauschs

Der Impulstransfer der kontinuierlichen auf die disperse Phase an den Phasengrenzflächen entspricht dem Erhaltungsprinzip, die Geschwindigkeits- und Konzentrationsfluktuationen $u_{i,d}$, bzw. α_d der dispersen Phase sind – ein dünnes Spray-Regime voraussetzend – an die Geschwindigkeitsfluktuationen $u_{i,g}$ der Gasphase gebunden. Die Interaktion der Tropfen mit der umgebenden kontinuierlichen Phase wird anhand des Terms des Impulstransfers $M_{j,p}$ der Impulserhaltungsgleichung beschrieben. Des weiteren muss über zusätzliche Terme dem Einfluss turbulenter Strukturen der Gasphase auf die Verteilung der Tropfen Rechnung getragen werden. Für den Term des Impulstransfers gilt entsprechend Gumprich:

$$M_{j,d} = C_{f,d} (u_{j,g} - u_{j,d}), \quad (2.67)$$

wobei $C_{f,d}$ den Reibungskoeffizienten der Auftriebskraft beschreibt und mittels der Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen nach unten stehender Gleichung bestimmt wird:

$$C_{f,d} = \frac{3}{4} \frac{\rho_g}{d} |\mathbf{u}_{\text{rel}}| \alpha_d = \frac{1}{8} C_D \rho_g |\mathbf{u}_{\text{rel}}| \left(\frac{6 \alpha_d}{d} \right). \quad (2.68)$$

Der Koeffizienten der Phasengrenzflächen γ_d und der Koeffizienten B_d wird wie folgt definiert:

$$\gamma_d = \frac{6 \alpha_d}{d}, \quad \text{und} \quad B_d = \frac{1}{8} C_D \rho_g |\mathbf{u}_{\text{rel}}|. \quad (2.69)$$

Unter Annahme, dass der Koeffiziente B_d konstant ist für Gleichung (2.68) ergibt sich:

$$C_{f,d} = B_d \gamma_d. \quad (2.70)$$

Eine Auswahl von Approximationen des Widerstandskoeffizienten C_D in Abhängigkeit der Reynolds-Zahl ist in Gleichung (3.80) zu finden. Eine Zerlegung der Geschwindigkeit $u_{i,p}$ und des Volumenanteils α_d nach Reynolds in einen Mittelwert und einen Schwankungswert resultiert zu:

$$\overline{M}_{j,d} = B_d \left(\overline{\gamma}_d (\overline{u}_{j,g} - \overline{u}_{j,d}) + \overline{\gamma'_d (u'_{j,g} - u'_{j,d})} \right), \quad (2.71)$$

wobei nach einer Anwendung der Favre-Mittelung, wie bei den vorangegangenen, Gleichung (2.71) umformuliert werden kann zu:

$$\overline{M}_{j,d} = \overline{C}_{f,d} (\tilde{u}_{j,g} - \tilde{u}_{j,d}) + M_{j,d}^{\text{TD}}. \quad (2.72)$$

Der Term $M_{j,d}^{\text{TD}}$ beschreibt hierbei den Einfluss der Turbulenz auf die Verteilung der Tropfen:

$$M_{j,d}^{\text{TD}} = -\overline{C}_{f,d} \left(\frac{\overline{\alpha'_g u'_{j,g}}}{\overline{\alpha}_g} - \frac{\overline{\alpha'_d u'_{j,d}}}{\overline{\alpha}_d} - \frac{\overline{\gamma'_d (u'_{j,g} - u'_{j,d})}}{\overline{\gamma}_d} \right) = -\overline{C}_{f,d} \left(\frac{\overline{\alpha'_g u'_{j,g}}}{\overline{\alpha}_g} - \frac{\overline{\alpha'_d u'_{j,g}}}{\overline{\alpha}_d} \right). \quad (2.73)$$

Das Lösen obiger Korrelationen der Varianz erfolgt über die Definition einer Driftgeschwindigkeit $u_{j,\text{drift}}$:

$$M_{j,d}^{\text{TD}} = \overline{C}_{f,d} u_{j,\text{drift}}, \quad \text{mit} \quad u_{j,\text{drift}} = \frac{D_{\text{gd}}^t}{\text{Pr}_\alpha} \left(\frac{1}{\overline{\alpha}_d} \left(\frac{\partial \overline{\alpha}_d}{\partial x_j} \right) - \frac{1}{\overline{\alpha}_g} \left(\frac{\partial \overline{\alpha}_g}{\partial x_j} \right) \right), \quad (2.74)$$

wobei die Driftgeschwindigkeit durch den Gradienten des Mittelwerts approximiert wird. Durch Zusammenfassen von Gleichung (2.72) bis (2.74) folgt somit:

$$\overline{M}_{j,d} = \overline{C}_{f,d} (\tilde{u}_{j,g} - \tilde{u}_{j,d} + u_{j,\text{drift}}). \quad (2.75)$$

Gleichung (2.75) kann wiederum für $N - 1$ disperse Phasen umformuliert werden zu:

$$\overline{M}_{j,g} = - \sum_{d=1}^{N-1} \overline{M}_{j,d}. \quad (2.76)$$

Gleichung (2.76) entspricht darüber hinausgehend dem eingangs erwähnten Erhaltungsprinzip.

2.2.6 Modellierung der Turbulenz in mehrphasigen Systemen

Die Fluktuation der Geschwindigkeit der dispersen Phase $u'_{i,d}$, sowie der Einfluss der Tropfen auf die Turbulenz der kontinuierlichen Phase wird mit dem Modell von Simonin und Viollet [116] beschrieben. Dieses Modell basiert, wie die Erhaltungs- und Transportgleichungen auch, auf einer zweifachen Mittelung der Gleichungen unter Vernachlässigung der Effekte von Tropfenkollisionen auf die Bewegung der Tropfen. Daher ist diese Annahme für dünne Spray-Systeme geeignet, findet jedoch ebenfalls bei dichten Spray-Systemen Anwendung.

Basierend auf dem Volumenanteil der dispersen Phase, den hieraus resultierenden Spray-Regimen, sowie den Kopplungsbedingungen (siehe Tabelle 2.2) lässt sich, wie in Abb. 2.5 dargestellt, der Einfluss der

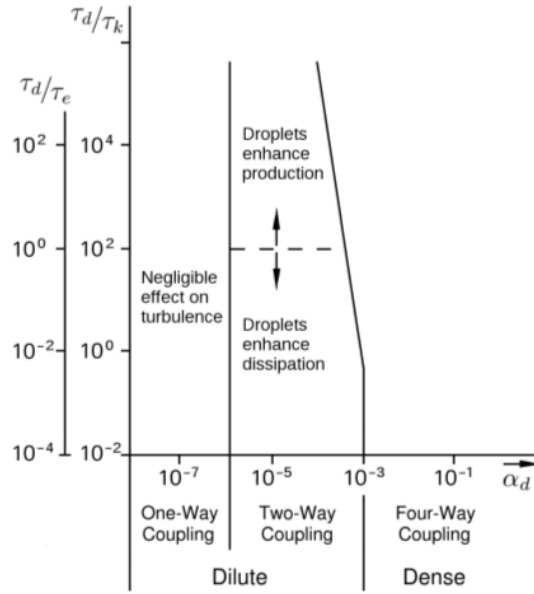


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung zur Klassifizierung der Interaktion zwischen den Tropfen und den turbulenten Strukturen, basierend auf dem Volumenanteil α_d der dispersen Phase, den Zeitskalen τ_d der dispersen Phase, der Zeit τ_c zwischen zwei Kollisionen und der Kolmogorovschen Zeitskala τ_k , bzw. τ_η [29].

Tropfen auf die Turbulenz unter Berücksichtigung der Zeitskala τ_d der dispersen Phase, der Zeitspanne τ_c zwischen zwei Kollisionen, sowie der Kolmogorovschen Zeitskala τ_k , bzw. τ_η (siehe hierzu Kapitel 2.2.6) darstellen. Übersteigt hierbei τ_d der dispersen Phase τ_η , wird die Produktion turbulenter Strukturen durch die Tropfen verstärkt, übersteigt wiederum die Kolmogorovsche Zeitskala τ_η τ_d , wird die Dissipationsrate gesteigert. Die Fluktuation der Tropfengeschwindigkeit wird dominiert von der Turbulenz der Gasphase, die Grundlage dieser Annahme stammt aus der Theorie von Tchen zur Verteilung von Tropfen in homogener Turbulenz. Zu den Annahmen von Tchen gehören unter Anderem die homogene und konstante Turbulenz der Gasphase in einer unendlichen räumlichen Ausbreitung [46]. Die Form der Tropfen wird hierbei als sphärisch angenommen, der Durchmesser d und die Relativgeschwindigkeit $u_{i,rel}$ zwischen disperser und kontinuierlicher Phase sind hinreichend gering, und entsprechen dem Stokeschen Widerstandsgesetz (siehe hierzu Kapitel 3.2.3). Desweiteren weisen die Tropfen einen geringeren Durchmesser auf als die kleinsten turbulenten Strukturen, die Eigenschaften des umgebenden Fluids sind konstant und auf die Tropfen wirkende Kräfte gehen aus einem Potentialfeld, z. B. Gravitationsfeld, hervor.

Die turbulente kinetische Energie k , sowie die Dissipation ε der kontinuierlichen Phase werden mit dem in Kapitel 2.2.6, Gleichung (2.44) vorgestellten Ansatz modelliert. Im Rahmen von Mehrphasenströmungen ist jedoch ein zusätzlicher, die Interaktion der Phasen miteinander beschreibender, Quellterm S_{k_g} (siehe Gl. (2.77)) zu berücksichtigen:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \bar{\alpha}_g k_g) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_g \bar{\alpha}_g \tilde{u}_{i,g} k_g) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\alpha}_g \left(\mu_g + \frac{\mu_g^t}{Pr_k} \right) \frac{\partial k_g}{\partial x_i} \right) + \bar{\alpha}_g G_{k_g} - \bar{\alpha}_g \rho_g \varepsilon_g + S_{k_g}. \quad (2.77)$$

Die Kopplung der kontinuierlichen Phase mit $N - 1$ dispersen Phasen wird mit dem Ansatz von Simonin und Viollet wie folgt approximiert:

$$S_{k_g} = \sum_{d=1}^{N-1} \bar{\alpha}_g \bar{C}_{f,d} (k_{g,d} - 2k_g + u_{i,rel} u_{i,drift}). \quad (2.78)$$

Der Reibungskoeffizient $\bar{C}_{f,d}$ wird entsprechend Gleichung (2.68) berechnet. Der Term $k_{g,d}$ beschreibt die Kovarianz der Gasphasen- und der Tropfengeschwindigkeit und wird im Folgenden erläutert. Die Relativgeschwindigkeit wird aus der Differenz der Favre-gemittelten Geschwindigkeiten und der Driftgeschwindigkeit (siehe Gleichung (2.74)) bestimmt, somit ergibt sich $u_{i,rel} = (\tilde{u}_{i,g} - \tilde{u}_{i,d} - u_{i,drift})$. Die Bestimmung der Dissipation ε der turbulenten kinetischen Energie der Gasphase weist nach einer Favre-Mittelung folgende Form auf:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \bar{\alpha}_g \varepsilon_g) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \bar{\alpha}_g \tilde{u}_{i,g} \varepsilon_g) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\alpha}_g \left(\mu_g + \frac{\mu_g^t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial x_i} \right) + \bar{\alpha}_g \frac{\varepsilon_g}{k_g} (C_{\varepsilon 1} G_{k_g} - C_{\varepsilon 2} \rho_g \varepsilon_g) + S_{\varepsilon_g}. \quad (2.79)$$

So wie bei der Gleichung (2.77) der turbulenten kinetischen Energie k_g , ist auch bei der Gleichung der Dissipation (2.79) ein Quellterm S_{ε_g} zur Berücksichtigung des Einflusses der dispersen Phase zu beachten:

$$S_{\varepsilon_g} = C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon_g}{k_g} S_{k_g}. \quad (2.80)$$

Für den empirischen Koeffizienten $C_{\varepsilon 3}$ wird ein Wert von $C_{\varepsilon 3} = 1,2$ angenommen. Die weiteren Koeffizienten sind Tabelle 2.1 zu entnehmen, in der die Parameter des k - ε -Modell aufgelistet sind. Die turbulente Viskosität μ_d^t der dispersen Phase wird, basierend auf der Theorie von Tchen und unter Berücksichtigung der auf einen Tropfen wirkenden Trägheitskräfte, wie folgt formuliert:

$$\mu_d^t = \rho_d \left(D_{g,d}^t + \left(\frac{2}{3} k_d - \frac{1}{3} b k_{g,d} \right) \tau_d \right). \quad (2.81)$$

Der Koeffizient $D_{g,d}^t$ beschreibt den Einflusses turbulenter Strukturen der Gasphase auf die Dispersion der Tropfen, τ_d gibt ein tropfenspezifisches Zeitmaß an. Der Dispersionskoeffizient $D_{g,d}^t$ wird entsprechend unten stehender Gleichung berechnet:

$$D_{g,d}^t = \frac{1}{3} k_{g,d} \tau_{g,d}^t, \quad (2.82)$$

wobei durch den Faktor b der sog. virtuelle Masseneffekt der Tropfen berücksichtigt wird:

$$b = \frac{1 + C_A}{\rho_d / \rho_g + C_A}. \quad (2.83)$$

Sofern der Dichteunterschied der kontinuierlichen und der dispersen Phase $\rho_d \gg \rho_g$ hinreichend groß wird, gilt infolgedessen $b \rightarrow 0$. Der Koeffizient der zusätzlichen Masse C_A wird empirisch ermittelt und entspricht $C_A = 0,5$. Die turbulente kinetische Energie der dispersen Phase k_d ist proportional zur kinetischen Energie der kontinuierlichen Phase, sowie dem, das Verhältnis der Wirbel-Tropfen-Interaktionszeit definierende, Koeffizienten $\eta_{g,d}$ und entspricht:

$$k_d = k_g \left(\frac{b^2 + \eta_{g,d}}{1 + \eta_{g,d}} \right), \quad \text{mit} \quad \eta_{g,d} = \frac{\tau_{g,d}^t}{\tau_d}. \quad (2.84)$$

Die Gas-Tropfen-Geschwindigkeit-Kovarianz, die bereits in Gleichung (2.78), eingeführt wurde, ist wie folgt bestimmt:

$$k_{g,d} = 2 k_g \left(\frac{b + \eta_{g,d}}{1 + \eta_{g,d}} \right). \quad (2.85)$$

Die Herleitung der u. a. zur Bestimmung des Zeitverhältnisses $\eta_{g,d}$ relevanten drei Zeitskalen τ_d , $\tau_{g,d}^t$ und τ_g^t wird im Folgenden entsprechend Gumphrich [52] erläutert. Unter Einbeziehung des virtuellen Massen-Effekts durch den Koeffizienten C_A , sowie dem die Reibung beschreibenden Koeffizienten $\bar{C}_{f,d}$ folgt für die Tropfen-Relaxationszeit der Turbulenz:

$$\tau_d = \frac{\bar{\alpha}_d \rho_g}{\bar{\alpha}_g \bar{C}_{f,d}} \left(\frac{\rho_d}{\rho_g} + C_A \right). \quad (2.86)$$

Die Zeitskala der energietragenden Wirbel der Gasphase mit C_μ aus Tabelle 2.1 ist wie folgt definiert:

$$\tau_g^t = \frac{3}{2} C_\mu \frac{k_g}{\varepsilon_g}. \quad (2.87)$$

Die Wirbel-Tropfen-Interaktionszeit $\tau_{g,d}^t$ entspricht:

$$\tau_{g,d}^t = \frac{\tau_g^t}{\sqrt{1 + C_\beta \xi_r^2}} \quad \text{mit} \quad \xi_r = \frac{|\mathbf{u}_{\text{rel}}|}{\sqrt{2/3 k_g}}. \quad (2.88)$$

Ein Vorteil dieser Formulierung liegt in der Berücksichtigung sich kreuzender Tropfentrajektorien, bedingt durch den Faktor ξ_r im Rahmen des zugrundeliegenden k - ε -Turbulenzmodells. Im Rahmen dieser Arbeit wird $C_\beta = 0,45$ angenommen.

3 Grundlagen quadraturbasierter Momentenmethoden

Die Zerstäubung eines flüssigen Brennstoffs ist ein relevanter Prozess in vielen Industriezweigen, insbesondere in Feuerungsanlagen, Ottomotoren und den, im Fokus dieser Arbeit stehenden, Flugtriebwerken. Hauptcharakteristik eines Sprays ist die auf die Tropfen zurückzuführende, im Vergleich zum unzerstäubten Zustand vergrößerte, Gesamtoberfläche, wodurch z. B. die oberflächenabhängigen Massen- und Wärmetransferprozesse gesteigert werden. Eine stärkere Durchmischung der beiden Phasen wird durch turbulente Strukturen innerhalb der kontinuierlichen Phase erzielt. Insbesondere in reaktiver Umgebung ist die Art der Zerstäubung, und somit die Charakteristik des Spray, für die Bildung der Luftschadstoffe wie z. B. NO_x , CO_2 und unverbrannten Kohlenwasserstoffen, sowie für die erreichbare Leistung von Bedeutung. Die Zündfähigkeit, sowie die Stabilität der Flamme stehen in direkter Abhängigkeit von den Eigenschaften des Brennstoff-Oxidator-Gemischs.

Die Gliederung des nachfolgenden Kapitels baut auf der Williams-Boltzmann-Gleichung (3.5) zur Beschreibung eines Sprays auf; In einem ersten Schritt wird in Kap. 3.1 die zugrundeliegende DQMOM vorgestellt, sowie die darauf aufbauende, erstmalig von Gumplich[52] beschriebenen sektionsbasierten Formulierung der DQBSMOM 3.2. Das angewendete Verfahren des Splittings der Operatoren am transienten Term zur Lösung des resultierenden Gleichungssystems wird in Abschnitt 5.3.3 erläutert, der implementierte Algorithmus ist in Kap 5.3.3 detailliert abgebildet. Auf Basis des Splitting-Ansatzes und der in Kap. 3.2.2 vorgestellten allgemeinen Lösungsstrategien wird eine Unterteilung der auftretenden physikalischen Phänomene in einen sog. Transport im physikalischen Raum, sowie einen sog. Transport im phasenbasierten Raum vorgenommen. Im physikalische Raum (Kap. 3.2.3) werden die auf die Tropfen einwirkenden Volumen- und Oberflächenkräfte, wie z. B. die Schwerkraft, oder die strömungsabhängige Widerstandskraft, erörtert. Der Transport im phasenbasierten Raum 3.2.4 wiederum bezieht sich auf Wirkmechanismen, die das Volumen und die Oberfläche der Tropfen verändern, wie z. B. Massen- und Wärmetransferprozesse (Abschnitt 3.2.2), sowie die Koaleszens von Tropfen, siehe Abschnitt 3.2.4.

Hinsichtlich der zur Zerstäubung des Brennstoffs angewendeten Düsen gilt es zwischen zwei grundlegenden Varianten zu unterscheiden; der erste Düsentyp basiert auf dem Auseinanderbrechen eines Brennstoffstrahls, der mit einem hohem Einspritzdruck in die Gasphase injiziert wird, der zweite Düsentyp basiert auf dem aerodynamisch induzierten Auseinanderbrechen an der Phasengrenze aufgrund von Scherspannungen [11]. Nachfolgende Aufstellung stellt einen Überblick der auftretenden, und je nach Komplexitätsgrad der Simulation zu modellierenden Phänomene der Spray-Erzeugung dar:

- Zerstäubung des flüssigen Brennstoffs,
- Primärzerfall in Tropfen und Filamente,
- Sekundärzerfall der Tropfen.

Die Zerfallsmechanismen resultieren aus strömungsabhängigen Zerfallsmechanismen, sowie dem Einfluss der Zähigkeit und werden mit der Weber-Zahl (3.1) und der Ohnesorge-Zahl (3.2) beschrieben. Bedingt durch die Relativbewegung zwischen einem Tropfen und der kontinuierlichen Phase tritt eine ungleichförmige Druckverteilung, sowie Schubspannungen an der Tropfenoberfläche auf. Übersteigen diese extern induzierten Kräfte die durch die Oberflächenspannung aufgebrachten Kräfte, tritt sekundärer Tropfenzerfall auf. Im Rahmen vorliegender Arbeit werden diese physikalischen Mechanismen jedoch

nicht berücksichtigt. Die Verteilung der Tropfen, sowie die Tropfengrößen wird sowohl durch die Art der Zerstäubung als auch durch untenstehende physikalische Mechanismen beeinflusst:

- Impulsübertragung zwischen den Phasen,
- Tropfen-Tropfen-, Tropfen-Gas-, sowie Tropfen-Turbulenz-Interaktion,
- Massen- und Wärmetransfermechanismen,
- Reaktive Umgebungsbedingungen.

Die Impulsübertragung zwischen den Phasen und die Tropfen-Turbulenz-Interaktion resultiert u. A. aus der Geschwindigkeitsdifferenz von kontinuierlicher zu disperser Phase und wurde im vorangegangenen Kapitel 2.2.6 bereits vorgestellt. Die Tropfen-Tropfen-Interaktion beschreibt hierbei im Allgemeinen die Beeinflussung der Tropfenbewegung, -anzahl und -größe durch Kollisionen. Massen- und Wärmetransferprozesse resultieren u. A. aus einer Temperaturdifferenz zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase und führen – bei einer positiven Differenz wie in den betrachteten Testfällen – zu einer Erhöhung der Tropfentemperatur. Einhergehend mit dem Temperaturanstieg ist die temperaturabhängige Veränderung der Dichte innerhalb der Tropfen. Die maximale Tropfentemperatur ist durch die druckabhängige Siedetemperatur gegeben, die zu einem Phasenübergang des Brennstoffs an der Tropfenoberfläche vom dispersen in den gasförmigen Zustand führt. Mit dem Erreichen dieses beschriebenen Zustandes werden Massenübertragungsmechanismen relevant und der Aspekt der Sättigung der umgebenden kontinuierlichen Phase gewinnt an Relevanz. Der Zustand der Sättigung entspricht hierbei der maximalen Aufnahmefähigkeit der kontinuierlichen Phase für verdampften Brennstoff aus der dispersen Phase. Die kontinuierliche Phase gilt dann als gesättigt, wenn die Konzentration des verdampften Brennstoffs einen temperaturabhängigen Maximalwert erreicht hat. Wärme- und Massenübertragungsmechanismen bilden somit mit den Mischungsmechanismen innerhalb der kontinuierlichen Phase die Grundvoraussetzung einer Verbrennung. Je nach Zusammensetzung des Brennstoff-Oxidator-Gemischs liegt ein zünd- und brennbares Gemisch vor, das entweder einen vorgemischten oder nicht-vorgemischten Charakter aufweist (siehe Kap. 4.2). Die reaktionsbedingt höheren Temperaturen der kontinuierlichen Phase führen, neben einem Anstieg der Geschwindigkeiten, zu verstärkten Massen- und Wärmetransfermechanismen.

Die Weber-Zahl dient als Maß (siehe Gl. 3.1) für die Tropfenverformung und zur Charakterisierung der Zerstäubungsqualität eines Sprays. Je größer die Weber-Zahl ist, desto größer ist die Deformationswirkung der Anströmung auf den Tropfen, infolge dessen der Tropfen von der idealen sphärischen Kugelform abweicht. Die Weber-Zahl entspricht somit dem Verhältnis von deformierender Trägheitskraft der Relativströmung zur stabilisierenden Oberflächenkraft eines Tropfens. Die Ohnesorge-Zahl (3.2) beschreibt den Zähigkeitseinfluss bei der Deformation von Tropfen und hat ebenfalls Bedeutung für die Charakterisierung eines Zerstäubungsprozesses:

$$We = \frac{\rho_g |\mathbf{u}_{rel}|^2 d}{\sigma_d}, \quad (3.1)$$

$$Oh = \frac{\mu_d}{\sqrt{\rho_d \sigma_d d}} = \frac{\sqrt{We}}{Re_d}. \quad (3.2)$$

Der sekundäre Tropfenzerfall kann ebenfalls durch Angabe der Oberflächenspannung σ_d mit diesen beiden Kennzahlen beschrieben werden. Der mittlere Zeitraum τ_c zwischen zwei Kollisionen wird durch $\tau_c = 1/\nu_c$ beschrieben; ein statistischer Ansatz zur Approximation der gemittelten Tropfen-Tropfen-Kollisionsfrequenz ν_c wird nach [52] in Kapitel 3.2.4 vorgestellt. Die Stokes-Zahl St ist ein Maß für das Vermögen von Tropfen der umgebenden Strömung zu folgen, und stellt somit einen Zusammenhang zwischen den Trajektorien und den Stromlinien der kontinuierlichen Phase dar:

$$St = \frac{\tau_d}{\tau_f}. \quad (3.3)$$

τ_f repräsentiert hierbei ein charakteristisches Zeitmaß der Strömung. In Spray-Regimen mit $St \ll 1$ folgen die Tropfen einer Veränderung des Strömungsfelds der kontinuierlichen Phase sehr schnell. Dies ist z. B. bei Tropfen kleinen Durchmessers häufig der Fall. Für $St \gg 1$ wird die Bewegung der Tropfen nur in einem geringen Maß vom Strömungsfeld beeinflusst. Zudem kann anhand der Wahl eines charakteristischen turbulenten Zeitmaßes τ_f der Strömung der Einfluss der Turbulenz auf die Tropfenbewegung beschrieben werden. Die Tropfen-Reynoldszahl Re_d wiederum ist eine dimensionlose Kenngröße zur Beschreibung der Strömungscharakteristik und kennzeichnet den Umschlag einer laminaren zu einer turbulenten Strömungen. Sie ergibt sich aus dem Quotienten der Trägheitskraft und Zähigkeitskraft:

$$Re_d = \frac{\rho_g d u_{rel}}{\mu_g}, \quad (3.4)$$

wobei die Relativgeschwindigkeit $u_{rel} = u_g - u_d$ die Differenz zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase beschreibt. Eine schematische Darstellung des Zerstäubungsvorgangs hinsichtlich des variierenden dispersen Volumenanteiles ausgehend von der Injektionsdüse, sowie der auftretenden physikalischen Phänomene ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Im Nahbereich der Injektionsdüse zerfällt der Brennstoffstrahl in einem ersten Schritt in größere Tropfen und Ligamente, die wiederum im zweiten Schritt zu kleineren Tropfen zerfallen. Eine detaillierte Betrachtung der primären und sekundären Zerfallsmechanismen auf Basis eines Filmlegers im Kontext einer Grobstruktursimulation findet sich z. B. bei Sauer [108]. Zusätzlich zu den Zerfallsmechanismen müssen bereits mit dem Austritt aus der Injektionsdüse Tropfen-Tropfen-Interaktionen, sowie die Verdampfung der Tropfen berücksichtigt werden. Die methodische Grundlage der Modellierung von polydispersen Sprays bildet die in der Einleitung erwähnte Williams-Spray-Gleichung [143]. Diese Gleichung beschreibt die Entwicklung einer Verteilungsfunktion f der Tropfen hinsichtlich auftretender physikalischer Phänomene und basiert auf einem statistischen Ansatz:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i f) = \Gamma - \frac{\partial}{\partial u_i} (F_i f) - \frac{\partial}{\partial \phi} (R_\phi f) - \frac{\partial}{\partial T} (\theta f), \quad (3.5)$$

wobei R_ϕ und θ den Massen- bzw. Wärmeübertragungsmechanismen beschreiben, F_i die auf die Tropfen wirkenden Kräfte und Γ nicht-kontinuierlichen Phänomene, wie z. B. Koaleszens von Tropfen.

Eine Verteilungsfunktion kann sowohl einen diskreten, als auch einen kontinuierlichen Charakter aufweisen. Eine schematische Darstellung dieser möglichen Erscheinungsformen findet sich in Abb. 3.2. Die Verteilungsfunktion – im vorliegenden Fall eine kontinuierliche Verteilungsfunktion – kann anhand der sie beschreibenden Momente charakterisiert werden. Anstatt folglich die Evolution der Verteilungsfunktion

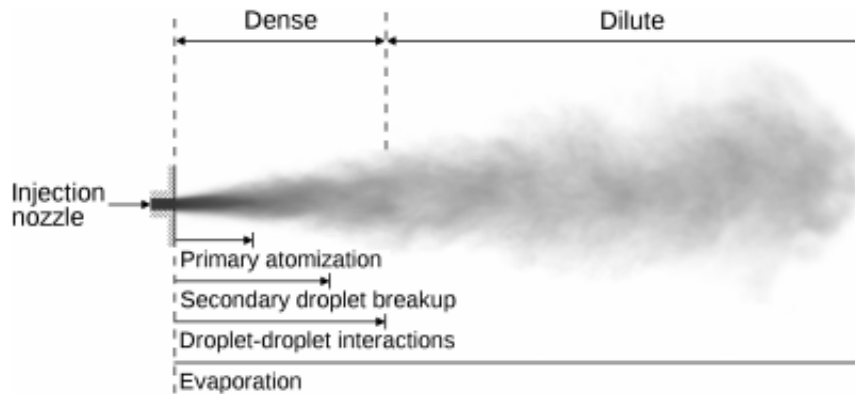


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung eines Sprays hinsichtlich der auftretenden physikalischen Phänomene des Primär- und Sekundärzerfalls, der Tropfen-Tropfen-Interaktionen und der Verdampfung.

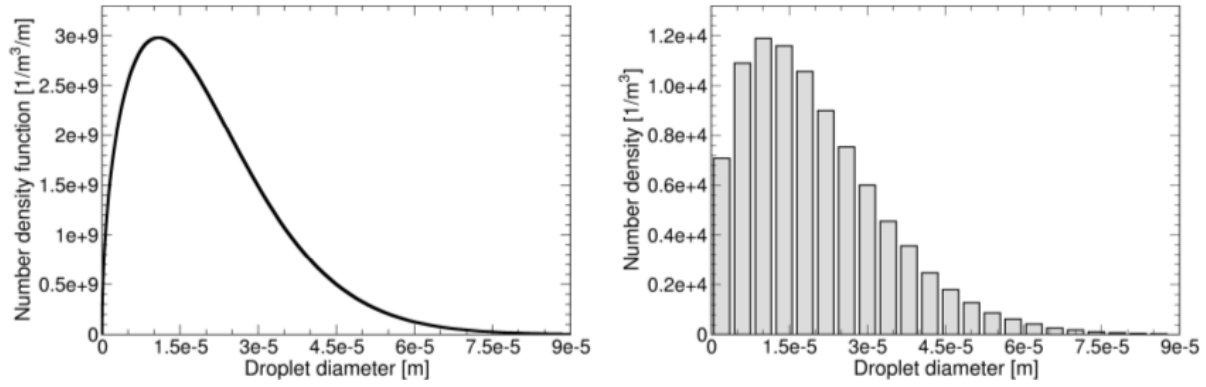


Abbildung 3.2: Darstellung einer kontinuierlichen (links) und einer diskreten (rechts) Verteilungsfunktion zur Charakterisierung mehrphasiger Strömungen.

selbst zu berechnen, werden die Momente bestimmt, um hieraus wiederum die Verteilungsfunktion zu rekonstruieren. In der numerischen Mathematik bezeichnet numerische Integration – auch als numerische Quadratur bezeichnet – diese näherungsweise Berechnung von Integralen. In technischen Fragestellungen sind die Integrale oftmals nicht direkt lösbar, weil für den Integranden keine zugrundeliegende Stammfunktion angegeben werden kann oder der Integrand nur durch diskrete Werte, etwa anhand experimenteller Resultate, gegeben ist. Entsprechend der mathematischen Beschreibung der dispersen Phase kann eine Unterscheidung in eine mikroskopische, eine makroskopische, sowie eine mesoskopische Betrachtungsweise vorgenommen werden. Im Rahmen der mikroskopischen Beschreibung werden Einzeltropfen und deren Grenzflächen betrachtet, die wiederum mithilfe geeigneter numerischer Modelle, wie z. B. der *Volume-of-fluid*-, oder der *Level-set*-Methode, beschrieben werden müssen [23, 86]. Die makroskopische Betrachtung wiederum basiert ausschließlich auf Mittelwerten mikroskopischer Größen wie Masse, Impuls und Enthalpie und findet im Rahmen der Euler-Euler-Ansätze Anwendung [48]. Die mesoskopische Beschreibung basiert auf einer statistische Beschreibung wie in Gleichung (3.5) dargestellt und findet im Rahmen dieser Arbeit Anwendung. Auf einer mesoskopischen Ebene (siehe Abb. 3.3) zur Beschreibung der Phasen bieten sich zwei Ansätze an, um die Williams-Spray-Gleichung zu lösen – der stochastische Ansatz nach Lagrange und der nach Euler. Obwohl die stochastischen Lagrange-Methoden in der Lage sind, die Spray-Gleichung detailliert zu beschreiben, finden sie in vorliegender Arbeit keine Anwendung, da der Rechenaufwand stark von der Tropfenbeladung, sowie möglichen Instationaritäten des Sprays abhängt. Stattdessen liegt dieser Arbeit die Euler-basierte Momentenmethode zugrunde. Bei Euler-basierten Verfahren weisen die Bilanzgleichungen der kontinuierlichen und der dispersen Phase die gleiche Struktur auf, was zu einem geringeren Rechenaufwand und einer vergleichsweise besseren Parallelisierbarkeit des Löser führt [19, 63]. Eine kontinuierliche Tropfenverteilungsfunktion f_d sei in Abhängigkeit der Variablen des Orts, der Zeit und des Durchmessers als Beispiel vorgestellt. Die Tropfenanzahl $n(\mathbf{x}, t; d)$ des gleichen Tropfendurchmessers d pro Volumeneinheit ist durch:

$$n(\mathbf{x}, t; d) = \int f_d(\mathbf{x}, t; d) dd \quad (3.6)$$

gegeben. Eine *Number Density Function* (NDF) kann hierbei anhand zusätzlicher charakteristischer Merkmale wie z. B. der Geschwindigkeit u_i oder der Temperatur T , definiert werden. In diesem Fall wird dann von einer *Joint Number Density Function* (jNDF) gesprochen.

Bei einer Beschreibung der Verteilung mithilfe ihrer Momente gilt, dass ein Moment q ter Ordnung des Durchmessers d durch Multiplikation mit der NDF:

$$m^q(\mathbf{x}, t) = \int_0^\infty d^q f_d(\mathbf{x}, t; d) dd. \quad (3.7)$$

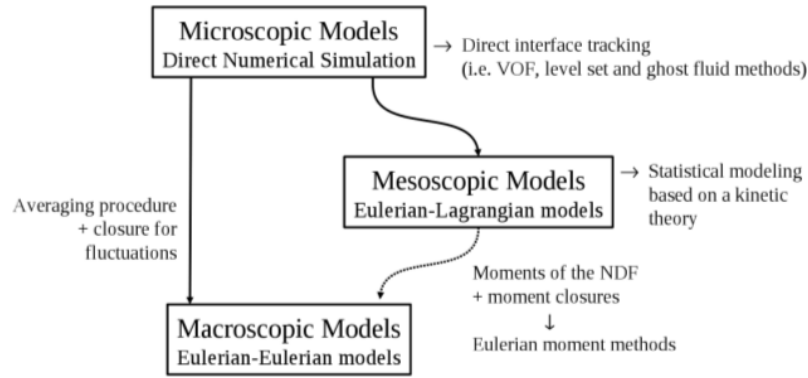


Abbildung 3.3: Übersicht der zur Auswahl stehenden Ansätze für die Simulation von Mehrphasenströmungen nach [140].

entspricht. Die Momente beinhalten hierbei die relevanten Informationen zur Charakterisierung eines Spray-Systems; das Moment nullter Ordnung $m_{d,0}$ beschreibt zum Beispiel die Gesamtanzahl von Tropfen, das Moment dritter Ordnung $m_{d,3}$ ist proportional zum Volumen der Tropfen. Zusätzlich kann die Verteilungsfunktion f_d durch weitere, geometrisch vom Durchmesser d abhängige, Verteilungsfunktionen der Oberfläche (f_s) oder des Volumens (f_v) ausgedrückt werden:

$$f_d(d) dd = f_s(d) dS = f_v(d) dV, \quad (3.8)$$

wobei die Momente ebenfalls untereinander austauschbar sind. So ergibt sich zum Beispiel $m_{d,0} = m_{s,0} = m_{v,0}$, bzw. $m_{s,1} = \pi m_{d,2}$ und $m_{v,1} = \pi/6 m_{d,3}$ nach [52]. Aus den Momenten einer NDF lassen sich desweiteren Informationen hinsichtlich der in einem Spray vorliegenden mittleren Durchmesser gewinnen. Der Ansatz zur Berechnung der mittleren Durchmesser entspricht hierbei:

$$D_{jk}^{j-k} = \frac{\int_0^\infty d^j f_d(\mathbf{x}, t; d) dd}{\int_0^\infty d^k f_d(\mathbf{x}, t; d) dd} = \frac{m_{d,j}(\mathbf{x}, t)}{m_{d,k}(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.9)$$

Die hervorhebenswerten Klassen der mittleren Tropfendurchmesser sind in Tabelle 3.1 vorgestellt. Die mittleren Tropfendurchmesser sind zur Beschreibung von Spray-Systemen im experimentellen Kontext von Bedeutung und somit für eine Validierung anhand experimenteller Daten relevant.

Tabelle 3.1: Charakteristische Tropfendurchmesser im Rahmen der Modellierung von Sprays [64].

	Bezeichnung	Erläuterung
D_{10}	Arithmetisch mittlerer Durchmesser	Mittlerer Durchmesser aller Tropfen.
D_{20}	Oberflächenbezogener mittlerer Durchmesser	Mittlerer Durchmesser eines Tropfens, dessen Oberfläche multipliziert mit der Gesamtzahl der Tropfen die Oberfläche der dispersen Phase ergibt.
D_{30}	Volumenbezogener mittlerer Durchmesser	Mittlerer Durchmesser eines Tropfens, dessen Volumen multipliziert mit der Gesamtzahl der Tropfen das Volumen der dispersen Phase ergibt.
D_{32}	Sauterdurchmesser	Durchmesser eines Tropfens, der das gleiche Volumen-zu-Oberflächen-Verhältnis aufweist wie das Spray.

Momentenmethoden werden zur statistischen Beschreibung von Sprays angewendet und basieren auf dem in Abschnitt 2.2 vorgestellten Eulerschen Multi-Fluid-Ansatz. Die exakte Kenntnis der Verteilungsfunktion

eines für das Spray charakteristischen Größenmaßes, zum Beispiel des Durchmessers d , ist bei diesen Methoden nicht zwangsläufig erforderlich, da die NDF anhand ihrer charakteristischen Momente beschrieben werden kann. Im Rahmen der Momententransformation wird die Williams-Spray-Gleichung (3.5) integriert, hieraus resultieren nicht-lineare Terme. Zur Schließung dieser nicht-linearen Terme werden quadraturbasierter Momentenmethoden, erstmalig von McGraw [84] im Jahr 1997 beschrieben, angewendet. Diese Formulierung der Momentenmethoden basiert auf der Approximation der Verteilungsfunktion mithilfe einer Summe gewichteter Dirac-Delta-Funktionen. Diese Summe repräsentiert hierbei eine numerische Quadratur, was gleichbedeutend mit der Integration der Verteilungsfunktion ist. Im Rahmen der direkten quadraturbasierten Momentenmethoden nach Marchisio u. Fox [79] werden Transportgleichungen für die Gewichtung und Abszisse berechnet. Die Vorteile der beschriebenen Momentenmethoden liegen in der vergleichbaren Struktur der Bilanzgleichungen. Dies wiederum führt zu einer erleichterten Kopplung der kontinuierlichen und der dispersen Phase. Zudem ist die erreichbare Genauigkeit der Simulationsergebnisse unabhängig von der Tropfenanzahl, sowie möglichen Instationaritäten des Systems.

3.1 Direct Quadrature Method of Moments

Eine Verteilungsfunktion f eines charakteristischen Längenmaßes der Tropfen eines Sprays kann anhand der, die Form der NDF beschreibenden, Momente dargestellt werden. Der Ansatz der DQMoM nach Fox [35] basiert auf der Approximation der NDF der Williams-Spray-Gleichung 3.5 zur Darstellung der räumlichen und zeitlichen Entwicklung der Verteilungsfunktion. Die Funktion der Momente im Kontext der Verteilungsfunktion eines charakteristischen Längenmaßes eines Sprays lässt sich wie folgt darstellen:

- Das 0. Moment ist proportional zur Gesamtanzahl der Tropfen,
- Das 1. Moment ist proportional zum mittleren Durchmesser,
- Das 2. Moment ist proportional zur Tropfenoberfläche,
- Das 3. Moment ist proportional zum Tropfenvolumen.

Einleitend sei eine jNDF $f(\phi, \mathbf{u}(\phi), T(\phi))$ in Abhängigkeit eines charakteristischen Längenmaßes ϕ , der konditionierten Geschwindigkeit $\mathbf{u}(\phi)$ und der ebenfalls konditionierten Temperatur $T(\phi)$ vorgestellt – in der Fachliteratur wird diesbezüglich von einer monokinetischen Annahme gesprochen. Dies bedeutet, dass die Tropfen gleichen charakteristischen Längenmaßes an einer bestimmten Position im physikalischen Raum zu einer bestimmten Zeit sowohl die gleiche Geschwindigkeit, als auch die gleiche Temperatur aufweisen.

Die NDF $f(\phi, \mathbf{u}, T)$ wird als Summe von Quadraturpunkten, den sog. DQMoM-Punkten, wie folgt beschrieben:

$$f(\phi, \mathbf{u}, T) \approx \sum_{n=1}^N w_n \delta(\phi - \phi_n) \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_n) \delta(T - T_n), \quad (3.10)$$

hierbei bezeichnet N die Gesamtanzahl der die NDF beschreibenden DQMoM-Punkte, w_n die Gewichtung, definiert als Tropfenanzahl pro Volumeneinheit, ϕ_n den Abszissenwert des charakteristischen Längenmaßes und T_n den Wert der Temperatur auf der Abszisse. Für den konditionierten Geschwindigkeitsvektor \mathbf{u}_n in Gl. (3.10) gilt nach Fox et al. [35]:

$$\delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_n) = \delta(u - u_{1,n}) \delta(u - u_{2,n}) \delta(u - u_{3,n}). \quad (3.11)$$

Eine schematische Darstellung der Vorgehensweise ist Abb. 3.4a und 3.4b zu entnehmen. Anstelle des Lösen einer Transportgleichung der Momente m^q (siehe Gl. (3.13)) der NDF – dies ist ein Standardvorgehen

bei Momentenmethoden – wird im Rahmen von DQMoM-basierten Berechnungsansätzen die Entwicklung der Gewichtung w_n und des Abszissenwerts ϕ_n – die sog. Quadraturpunkte – direkt berechnet. Anhand der Quadraturpunkte können die Momente m^q der Verteilungsfunktion anschließend rekonstruiert werden. Eine Anwendung der Momententransformation auf die Williams-Spray-Gleichung (3.5) nach [49] liefert:

$$\begin{aligned} \iiint \phi^q u_1^l u_2^m u_3^p T^\theta \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i f) \right) dv d\mathbf{u} dT = \\ = \iiint \phi^q u_1^l u_2^m u_3^p T^\theta \left(-\frac{\partial}{\partial u_i} (F_i f) - \frac{\partial}{\partial v} (R_v f) - \frac{\partial}{\partial T} (\theta f) + \Gamma \right) dv d\mathbf{u} dT. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Fox et al. [21] schlagen in der grundlegenden Formulierung der DQMoM – unter Vernachlässigung der Tropfentemperatur – eine Wahl von $5 \cdot N$ Momenten vor; N Momente für die Gewichtung w_n , N Momente für den Abszissenwert ϕ_n des charakteristischen Größenmaßes, sowie $3 \cdot N$ Momente für die Geschwindigkeit $u_{i,n}$ auf der Abszisse. Da bei Gumprich [52] zusätzlich der Abszissenwert T_n der Tropfentemperatur berechnet wird, müssen somit $6 \cdot N$ Momente gewählt werden. Die Quadraturpunkte werden zu Beginn jeder Simulation initial mit dem *Product-Difference* (PD)-Algorithmus bestimmt. Zur Bestimmung von N Abszissenwerten und den entsprechenden Gewichtungen werden im Rahmen des PD-Algorithmus die ersten n Momente m_n mit $n = 0, \dots, 2 \cdot N - 1$ der Verteilungsfunktion f benötigt. Die Berechnungsvorschrift der Momente aus den gewichteten DQMoM-Punkten entspricht somit:

$$m^q = \int_0^\infty \phi^q f(\phi, \mathbf{u}(\phi), T(\phi)) d\phi = \sum_{n=1}^N w_n \phi_n^q, \quad (3.13)$$

wobei im vorliegenden Fall der Index q die Ordnung des Moments m des charakteristischen Längsmaßes angibt. Durch Einsetzen des Ansatzes zur Approximation der NDF aus Gleichung (3.10) in die Williams-Spray-Gleichung (3.5) ergeben sich die DQMoM-Transportgleichungen der Tropfenanzahl (3.14), der gewichteten Masse (3.15), des gewichteten Impuls (3.16) und der ebenfalls gewichteten Temperatur (3.17), wobei zur Herleitung der Eulerschen Transportgleichungen der Abszissenwert des charakteristischen Längsmaßes ϕ durch das charakteristische Volumen v ersetzt wird:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_n) + \frac{\partial}{\partial x_i} (w_n u_{i,n}) = a_n, \quad (3.14)$$

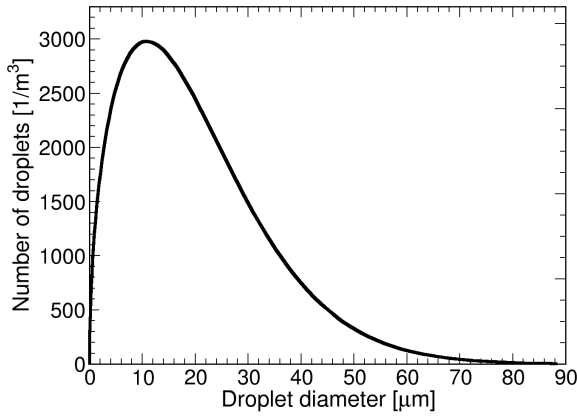
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_n v_n) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_n v_n u_{i,n}) = \rho b_n, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_n v_n u_{j,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_n v_n u_{j,n} u_{i,n}) = \rho c_{j,n}, \text{ und} \quad (3.16)$$

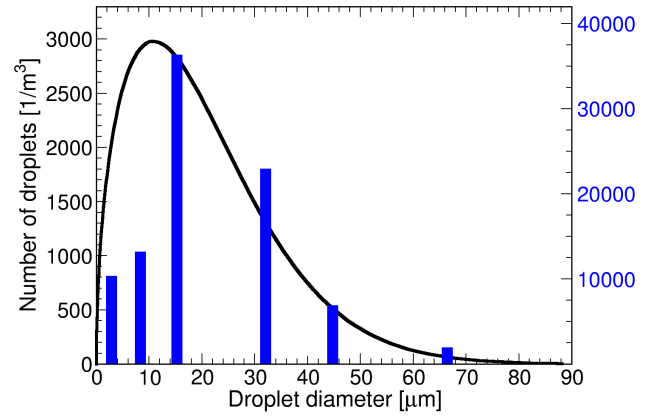
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_n v_n T_n) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_n v_n T_n u_{i,n}) = \rho d_n. \quad (3.17)$$

Die DQMoM-Quellterme a_n , b_n , $c_{j,n}$ und d_n auf der jeweils rechten Seite dienen der Beschreibung des Einflusses der wirkenden Kräfte, des Wärme- und Massentransfers, sowie der Koaleszens. Die Bestimmung der DQMoM-Quellterme erfolgt anhand einer im folgenden Kapitel beschriebenen Momententransformation. Eine schematische Darstellung der Approximation der Verteilungsfunktion im Rahmen einer DQMoM ist Abb. 3.4a und Abb. 3.4b zu entnehmen.

Als vorteilhaft bei der Anwendung DQMoM-basierter Methoden hat sich die vergleichbare Struktur zu den bereits beschriebenen Transportgleichungen der dispersen Phase (siehe Kap. 2.2) herausgestellt, die zu einer Kopplung mit der vorgestellten Multi-Fluid-Methode führt. Zudem wird die Polydispersität eines



(a) Schematische Darstellung der ursprünglichen Verteilungsfunktion $f(x, t)$ der Tropfenanzahl und des Tropfendurchmessers.



(b) Approximation der Verteilungsfunktion mit gewichteten Dirac-Funktionen. Die Gewichtungen sind als blaue Balken dargestellt.

Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Vorgehensweise bei einer DQMoM. Abb. (a) zeigt die ursprüngliche Verteilungsfunktion, Abb. (b) die Approximation mit den beschreibenden Momenten.

Sprays mit bereits wenigen DQMoM-Punkten hinreichend exakt beschrieben. Der zentrale Nachteil der DQMoM liegt darin, dass lediglich die Momente der NDF bekannt sind und eine akkurate Approximation der Flüsse verdampfender Tropfen somit nicht direkt möglich ist. Hinsichtlich des Aspekts der numerischen Stabilität ist die Verwendung einer möglichst geringen Anzahl von Quadraturpunkten zu bevorzugen; für akkurate und aussagekräftige Simulationsergebnisse ist jedoch eine möglichst hohe Anzahl an Quadraturpunkten relevant bezüglich des konvektiven Transports und der Widerstandseffekte. Eine ausführliche Diskussion ist bei Gumprich [52, S. 58] zu finden. Eine Beschreibung von Simulationen mit der DQMoM, sowie der betrachteten Testfälle ist z. B. der Veröffentlichung Gutheil et al. [44] oder der Dissertation von Choi [16] zu entnehmen.

3.2 Direct Quadrature based Sectional Method of Moments

Die DQbSMoM ist eine hybride, auf dem Euler-Ansatz basierende, Methode zur Lösung der Williams-Spray-Gleichung (3.5). Die Approximation der NDF erfolgt im Vergleich zur DQMoM auf Basis einer in Sektionen unterteilten Verteilungsfunktion. Die zugrunde liegende Williams-Spray-Gleichung (3.5) beschreibt den Transport einer Verteilungsfunktion f auf den Abszissen der betrachteten Größen wie z. B. der Abszisse eines charakteristischen Maßes ϕ . Hierzu wird die eingangs beschriebene DQMoM mit der SM nach Kah et al. [68] kombiniert. Anwendungen des sektionsbasierten Ansatzes finden sich in der Dissertation von Schneider [112], sowie vor dem Hintergrund der DQbSMoM in den Veröffentlichungen von Gumprich [49, 52, 53]. Annehmend, dass die DQMoM eine Approximation der NDF der Tropfengrößenverteilung mit einer Sektion darstellt, wird durch eine Erhöhung der Sektionsanzahl eine Erhöhung der Anzahl von DQMoM-Punkten erreicht. Somit kann eine höhere Anzahl von DQMoM-Punkten bei gleichbleibender numerischer Stabilität verwendet werden.

Erst die Kenntnis der verdampfungsbedingten Flüsse erlaubt eine Unterteilung der Verteilungsfunktion in mehrere Sektionen, und somit die Kopplung von DQMoM mit SM. Der Modellierungsansatz nach Kah et al. [68] zur Beschreibung des Wärme- und Massentransfers anhand des EMSM-Modells wird von Gumprich erstmalig in realen Konfigurationen angewendet. Die Beschreibung des Flusses der verdampfenden Tropfen an den Sektionsgrenzen erfolgt mit dem von Massot et al. [82] beschriebenen EMSM-Algorithmus im phasenbasierten Raum. Die Rekonstruktion der NDF erfolgt anhand der Momente mit der *Maximum Entropy* (ME)-Methode. Gumprich schlägt darüber hinausgehend einen neuartigen

Ansatz zur Beschreibung der Akkumulation von Tropfen in dünnen Spray-Regimen bzw. der Koaleszenz als mögliches Ergebnis einer Tropfen-Tropfen-Kollision in dichten Spray-Regimen vor. Der Ansatz beruht auf einer statistische Beschreibung der Kollision, basierend auf der kinetischen Gastheorie. Im Rahmen des Ansatzes wird eine numerische Integration des Quell- und Senkenterms der Koaleszenz angewendet, die Rekonstruktion der NDF erfolgt in diesem Fall gleichermaßen mit der ME-Methode.

Vorteile bietet die DQbSMoM hinsichtlich einer höheren numerischen Stabilität des Gleichungslösers, sowie der akkurateren Beschreibung des konvektiven Transports und der, mit den Massentransferprozessen verbundenen Momentenflüsse. Im vorliegenden Fall werden von Gumprich [52] zwei DQMoM-Punkte pro Sektion mit Momenten nullter bis dritter Ordnung pro Sektion bei Verwendung dreier Sektionen vorgeschlagen. Die Summe der betrachteten DQMoM-Punkte kann durch Hinzufügen weiterer Sektionen erhöht werden. Im Regelfall wird auf eine monokinetische Annahme – die Geschwindigkeit der Tropfen ist hierbei auf den Tropfendurchmesser konditioniert – zurückgegriffen. Die Größen-Geschwindigkeits-Korrelation kann mit der von Vié et al. [139] vorgeschlagenen *Coupled Size-Velocity Method* (CSVM)-Methode beschrieben werden, die jedoch im Rahmen dieser Arbeit keine Anwendung findet. Die Vorgehensweise im Rahmen der DQbSMoM – ausgehend von der Unterteilung der Verteilungsfunktion in Sektion und Approximation mit den Momenten innerhalb der Sektionen – ist in Abb. 3.5a und 3.5b dargestellt. Der Modellierungsansatz der DQbSMoM beinhaltet hierbei zwei wesentliche Bestandteile. Zum einen den der Unterteilung der NDF in eine fixe, auf dem charakteristischen Maß ϕ basierende Anzahl N_s von Sektionen mit $I_k = [\phi_{k-1}, \phi_k)$, $k = 1, \dots, N_s - 1$ und $I_{N_s} = [\phi_{N_s-1}, \infty)$ für $\phi_0 = 0$ (siehe Gl. (3.18)), und zum anderen auf der Aufteilung der Terme der rechten Seite der Williams-Spray-Gleichung. Die Terme der rechten Seite werden hierbei in einen, den Transport im physikalischen Raum, und einen, den Transport im phasenbasierten Raum beschreibenden Bestandteil, aufgesplittet. Die auf die Tropfen wirkenden Kräfte wirken hierbei im physikalischen Raum, der Massen- und Wärmetransfer, sowie die Koaleszenz werden im phasenbasierten Raum beschrieben:

$$f(\phi, \mathbf{u}, T) = \sum_{k=1}^{N_s} f_k(\phi, \mathbf{u}, T). \quad (3.18)$$

Mit der Definition einer Indikatorfunktion für $f_k(\phi, \mathbf{u}, T)$ in einer Sektion I_k folgt für Gl. (3.18):

$$f_k(\phi, \mathbf{u}, T) = \begin{cases} f_k(\phi, \mathbf{u}, T) & , \text{ wenn } \phi \in [\phi_{k-1}, \phi_k), \\ 0 & \text{ andernfalls.} \end{cases} \quad (3.19)$$

Die Unterteilung der Sektion wird hierbei dergestalt vorgenommen, dass die Tropfenmasse jeweils äquivalent verteilt ist. Die Approximation der jNDF erfolgt unter Anwendung des DQMoM-Ansatzes innerhalb jeder Sektion anhand der Summe gewichteter Dirac-Funktionen (Gl. (3.10)), und ist entsprechend gegeben durch:

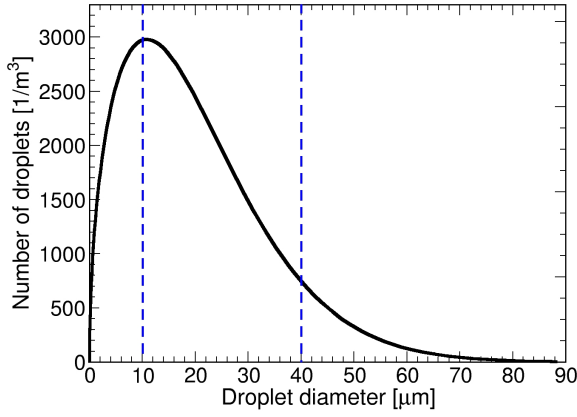
$$f_k(\phi, \mathbf{u}, T) \approx \sum_{n=1}^N w_{k,n} \delta(\phi - \phi_{k,n}) \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k,n}) \delta(T - T_{k,n}), \quad (3.20)$$

wobei der sektionsbasierte Geschwindigkeitsvektor $\delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k,n})$, vergleichbar zu Gleichung (3.11), lautet:

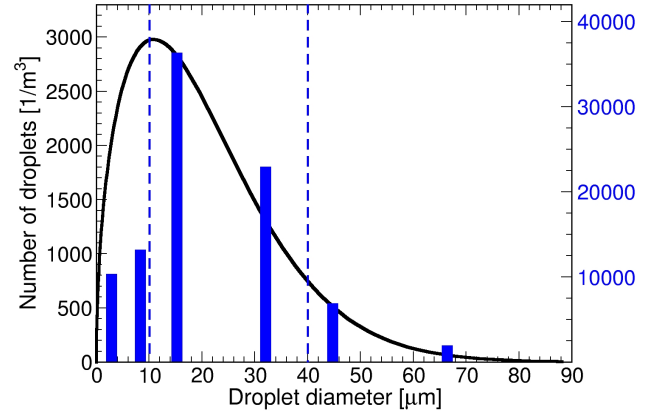
$$\delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k,n}) = \delta(u_1 - u_{1,k,n}) \delta(u_2 - u_{2,k,n}) \delta(u_3 - u_{3,k,n}). \quad (3.21)$$

Die Berechnung der Momente aus den gewichteten Quadratur-Punkten der Ordnung q für jede Sektion k entspricht:

$$m_k^q = \int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k} \phi^q f_k(\phi, \mathbf{u}(\phi), T(\phi)) d\phi = \sum_{n=1}^N w_{k,n} \phi_{k,n}^q. \quad (3.22)$$



(a) Schematische Darstellung der Unterteilung der Verteilungsfunktion $f(x,t)$ in drei Sektionen. Die Sektionsgrenzen sind blau gestrichelt dargestellt.



(b) Approximation der in Sektionen unterteilten Verteilungsfunktion $f(x,t)$ innerhalb der jeweiligen Sektionen mit Dirac-Funktionen.

Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Vorgehensweise bei einer DQbSMoM. Abb. (c) und (d) stellen die Vorgehensweise der Approximation/Rekonstruktion im Rahmen einer DQbSMoM, ausgehend von der Unterteilung der Verteilungsfunktionen in drei Sektionen mit der entsprechenden Approximation, dar.

Durch Einsetzen in die Williams-Spray-Gleichung 3.5 folgt mit $\phi = v$ entsprechend dem Ansatz der DQMoM die Transportgleichungen für die Gewichtung (3.23), die gewichtete Masse (3.24), den gewichteten Impuls und die gewichtete Temperatur (3.26) innerhalb jeder Sektion k :

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (w_{k,n} u_{i,k,n}) = a_{k,n}, \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{i,k,n}) = \rho b_{k,n}, \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n} u_{i,k,n}) = \rho c_{j,k,n}, \text{ und} \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n} u_{i,k,n}) = \rho d_{k,n}. \quad (3.26)$$

Die Quellterme $a_{k,n}$, $b_{k,n}$, $c_{j,k,n}$ und $d_{k,n}$ (Gl. (3.23) bis (3.26)) werden durch Phänomene innerhalb des physikalischen Raums, wie auf die Tropfen wirkende Kräfte (mit *force* bezeichnet), sowie durch die im Phasenraum auftretenden Phänomene der Massen- und Wärmetransferprozesse (*evap* und *heat*) und der Koaleszens (*coal*), bestimmt:

$$a_{k,n} = a_{k,n}^{\text{force}} + a_{k,n}^{\text{mass}} + a_{k,n}^{\text{heat}} + a_{k,n}^{\text{coal}}, \quad (3.27)$$

$$b_{k,n} = b_{k,n}^{\text{force}} + b_{k,n}^{\text{mass}} + b_{k,n}^{\text{heat}} + b_{k,n}^{\text{coal}}, \quad (3.28)$$

$$c_{j,k,n} = c_{j,k,n}^{\text{force}} + c_{j,k,n}^{\text{mass}} + c_{j,k,n}^{\text{heat}} + c_{j,k,n}^{\text{coal}}, \text{ und} \quad (3.29)$$

$$d_{k,n} = d_{k,n}^{\text{force}} + d_{k,n}^{\text{mass}} + d_{k,n}^{\text{heat}} + d_{k,n}^{\text{coal}}. \quad (3.30)$$

Zur Lösung der Gleichung (3.23) bis (3.26) erfolgt die eingangs erwähnte Aufteilung in den physikalischen und den phasenbasierten Raum; diese Aufteilung wird hierbei im nachfolgenden Abschnitt 5.3.3 detailliert beschrieben.

3.2.1 Splitting der Operatoren

Anhand des Splitting der Operatoren erfolgt eine separate Betrachtung der RHS der Williams-Spray-Gleichung. Der Splitting-Ansatz wird im Rahmen des EMSM-Modells zur Beschreibung des Wärme-

und Massentransfers, sowie für die Modellierung der Koaleszens in Betracht gezogen und dient der Beschreibung des Transports im phasenbasierten Raum. Von Vorteil ist, dass bei diesem Ansatz keinerlei Änderungen der Transportgleichungen der Multi-Fluid-Methode erforderlich sind und die numerische Stabilität durch Reduzierung der Komplexität der jeweiligen Gleichungen gewahrt bleibt [52]. Eine angepasste Formulierung der Williams-Spray-Gleichung (3.5) entsprechend einem Zweit-Schritt-Verfahren für den Transport im physikalischen (3.31) Raum und im phasenbasierten Raum (3.32) ergibt:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i f) = - \frac{\partial}{\partial u_i} (F_i f) \quad , \text{ sowie} \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial v} (R_v f) - \frac{\partial}{\partial T} (\theta f) + \Gamma , \quad (3.32)$$

wobei Gleichung (3.31) entsprechend (3.23) bis (3.26) äquivalent zu folgenden Gleichungen ist:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (w_{k,n} u_{i,k,n}) = a_{k,n}^{\text{force}} , \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{i,k,n}) = \rho b_{k,n}^{\text{force}} , \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n} u_{i,k,n}) = \rho a_{j,k,n}^{\text{force}} , \text{ und} \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n} u_{i,k,n}) = \rho d_{k,n}^{\text{force}} . \quad (3.36)$$

Gleichung (3.32) wiederum ist mit folgender Formulierung für die Sektionen $k = 1, \dots, N_s$ und die Momente $n = 1, \dots, N$ äquivalent zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{k,n}) = a_{k,n}^{\text{mass}} + a_{k,n}^{\text{heat}} + a_{k,n}^{\text{coal}} , \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n}) = \rho (b_{k,n}^{\text{mass}} + b_{k,n}^{\text{heat}} + b_{k,n}^{\text{coal}}) , \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n}) = \rho (c_{j,k,n}^{\text{mass}} + c_{j,k,n}^{\text{heat}} + c_{j,k,n}^{\text{coal}}) , \text{ und} \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n}) = \rho (d_{k,n}^{\text{mass}} + d_{k,n}^{\text{heat}} + d_{k,n}^{\text{coal}}) . \quad (3.40)$$

Eine weitere Aufsplittung obiger Gleichungen (3.32) liefert:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial v} (R_v f) , \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial T} (\theta f) , \text{ sowie} \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \Gamma . \quad (3.43)$$

Diese drei getrennte Ausdrücke dienen der Beschreibung des Massen- und Wärmetransfers, sowie der Koaleszens. Für den Massentransfer ergibt sich somit:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{k,n}) = a_{k,n}^{\text{mass}} , \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n}) = \rho b_{k,n}^{\text{mass}} , \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n}) = \rho c_{j,k,n}^{\text{mass}} , \text{ und} \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n}) = \rho d_{k,n}^{\text{mass}} . \quad (3.47)$$

Entsprechend erfolgt die Formulierung des Wärmetransfers mit der Kennzeichnung *heat*:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{k,n}) = a_{k,n}^{\text{heat}}, \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n}) = \rho b_{k,n}^{\text{heat}}, \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n}) = \rho c_{j,k,n}^{\text{heat}}, \text{ und} \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n}) = \rho d_{k,n}^{\text{heat}}. \quad (3.51)$$

Für die Koaleszens der Tropfen werden folgende Gleichungen aufgestellt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{k,n}) = a_{k,n}^{\text{coal}}, \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n}) = \rho b_{k,n}^{\text{coal}}, \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n}) = \rho c_{j,k,n}^{\text{coal}} \quad \text{und} \quad (3.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} T_{k,n}) = \rho d_{k,n}^{\text{coal}}. \quad (3.55)$$

Die vollständige Approximation der Williams-Spray-Gleichung wird durch sequentielles Lösen der im nachfolgenden Kapitel beschriebenen Gleichungen während eines Zeitschritts Δt erreicht. Eine detaillierte Beschreibung des Berechnungsalgorithmus, bestehend aus einem Strang-Splitting für den Transport im physikalischen Raum und einem Lie-Splitting für den Phasen-Raum findet sich in Kap. 5.3.3.

3.2.2 Allgemeine Lösungsstrategien

Nachfolgende Abschnitte dienen der Vorstellung allgemeiner Lösungsansätze der auf die Tropfen wirkenden Kräfte, des Wärme- und Massentransfers und der Koaleszens. Die Behandlung der auf die Tropfen wirkenden Kräfte werden nach der DQMoM-Methode im physikalischen Raum, mit dem von Fox et al. [35] vorgestellten Lösungsansatz, beschrieben. Im Rahmen vorliegender Ausarbeitung wird die Momententransformation und das resultierende DQMoM-Gleichungssystem, als Grundlage der Kopplung mit Multi-Fluid-Methoden aus Kap. 2.2, vorgestellt.

Dem im vorangegangenen Absatz 5.3.3 beschriebenen Splitting-Ansatz, Gleichung (3.31) und (3.32), folgend, wird die Behandlung der auf die Tropfen wirkende Kräfte im physikalischen Raum in Abschnitt 3.2.2 beschrieben. Die Behandlung des Wärme- und Massentransfers ist Abschnitt 3.2.2 zu entnehmen, die Behandlung der Koaleszens im phasenbasierten Raum ist in Abschnitt 3.2.2 erläutert,

Die auf einen Tropfen wirkenden Kräfte, Gl. (3.33) bis Gl. (3.36), können durch Einsetzen der Approximation der sektionsbasierten Verteilungsfunktion in Gleichung (3.31) entsprechend einer Momententransformation wie folgt ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}
 & \int_{v_{k-1}}^{v_k} \int \int v^q u_1^l u_2^m u_3^p T^\theta \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i f) \right) dv d\mathbf{u} dT = \\
 & = \sum_{n=1}^N (1-q) v_{k,n}^q u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^\theta a_{k,n} + \sum_{n=1}^N (q-l-m-p-\theta) v_{k,n}^{q-1} u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^\theta b_{k,n} + \\
 & + \sum_{n=1}^N v_{k,n}^{q-1} u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^\theta \left(l u_{1,k,n}^{-1} c_{1,k,n} + m u_{2,k,n}^{-1} c_{2,k,n} + p u_{3,k,n}^{-1} c_{3,k,n} \right) + \sum_{n=1}^N \theta v_{k,n}^{q-1} u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^{\theta-1} d_{k,n}. \quad (3.56)
 \end{aligned}$$

Für die RHS obiger Gleichung (3.56) ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 & - \int_{v_{k-1}}^{v_k} \int \int v^q u_1^l u_2^m u_3^p T^\theta \left(\frac{\partial}{\partial u_i} (F_i f) \right) dv d\mathbf{u} dT = \\
 & = \sum_{n=1}^N w_{k,n} v_{k,n}^q u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^\theta \left(l u_{1,k,n}^{-1} F_{1,k,n} + m u_{2,k,n}^{-1} F_{2,k,n} + p u_{3,k,n}^{-1} F_{3,k,n} \right), \quad (3.57)
 \end{aligned}$$

wobei für die Geschwindigkeit $u_{k,n}^{l,m,p} = u_{1,k,n}^l u_{2,k,n}^m u_{3,k,n}^p$, und für die allgemeine Beschreibung $F_{i,k,n} = F_i(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n})$ gilt. Aus den Gleichungen (3.56) und (3.57) wird mit der Wahl von $6 \cdot N$ nicht-singulären Momenten, siehe 3.2.2, ein lineares System erstellt.

$q = (i-1)/3$	$i \in \{1, \dots, 2N\}$	mit	$l = 0$	$m = 0$	$p = 0$	$\theta = 0$
$q = i$	$i \in \{1, \dots, N\}$	mit	$l = 1$	$m = 0$	$p = 0$	$\theta = 0$
$q = i$	$i \in \{1, \dots, N\}$	mit	$l = 0$	$m = 1$	$p = 0$	$\theta = 0$
$q = i$	$i \in \{1, \dots, N\}$	mit	$l = 0$	$m = 0$	$p = 1$	$\theta = 0$
$q = i$	$i \in \{1, \dots, N\}$	mit	$l = 0$	$m = 0$	$p = 0$	$\theta = 1$

Die Anzahl der Tropfen wird hierbei mit $l = m = p = \theta = 0$ bestimmt. Eine Bilanzierung des Impulses wird mit jeweils einem der Koeffizienten l, m oder p ungleich Null vorgenommen. Aus Gründen der Konsistenz mit der monokinetischen Annahme werden für die Geschwindigkeitskomponenten $u_{k,n}^{l,m,p}$ und für die Temperatur T^θ ausschließlich Momente nullter und erster Ordnung betrachtet [52]. Die Momententransformation führt auf ein lineares Gleichungssystem, das sog. DQMoM-Systems nach Fox et al. [35]. Das resultierende DQMoM-System ist in Gleichung (3.58) dargestellt:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{32} & \mathbf{A}_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{A}_{41} & \mathbf{A}_{42} & 0 & \mathbf{A}_{44} & 0 & 0 \\ \mathbf{A}_{51} & \mathbf{A}_{52} & 0 & 0 & \mathbf{A}_{55} & 0 \\ \mathbf{A}_{61} & \mathbf{A}_{62} & 0 & 0 & 0 & \mathbf{A}_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \\ \mathbf{c}_3 \\ \mathbf{d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_2 \\ \mathbf{B}_3 \\ \mathbf{B}_4 \\ \mathbf{B}_5 \\ \mathbf{B}_6 \end{bmatrix}. \quad (3.58)$$

Die Matrix mit den Einträgen \mathbf{A}_{ij} entspricht hierbei Gleichung (3.56), der Lösungsvektor auf der rechten Seite des Gleichungssystems entspricht Gleichung (3.57). Unter Beachtung der in Tabelle 3.2.2 beschriebenen Momente ergibt sich für den Lösungsvektor $\mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_2 = \mathbf{B}_6 = 0$, womit sich für die Quellterme des DQMoM-Systems folgende Lösung ergibt:

$$a_{k,n}^{\text{force}} = b_{k,n}^{\text{force}} = d_{k,n}^{\text{force}} = 0, \quad (3.59)$$

$$c_{k,n}^{\text{force}} = w_{k,n} v_{k,n} F_j(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n}). \quad (3.60)$$

Obige Gleichungen stellen eine konservative, d. h. die Masse der dispersen Phase erhaltende, Lösung der Transportgleichungen der Gewichtung (3.23), der gewichteten Masse (3.24), des gewichteten Impulses und der gewichteten Temperatur (3.26) innerhalb jeder Sektion k dar [52].

Behandlung des Massen- und Wärmetransfers im phasenbasierten Raum

Bei Betrachtung einer in mehrere Sektionen unterteilten NDF muss zusätzlich zu den Transportgleichungen der Momentenfluss zwischen den Sektionsgrenzen bestimmt werden. Die Approximation dieses Momentenflusses erfolgt anhand des EMSM-Modells. Dies ist notwendig, da der Momentenfluss bis zum vollständigen Verdampfen der dispersen Phase nicht mithilfe der Momente oder der Quadraturpunkte bestimmt werden kann. Da die Phänomene des Massen- und Wärmetransfers, beschrieben durch die Gleichungen (3.41) und (3.42), miteinander gekoppelt sind, werden sie in dieser Ausarbeitung gemeinsam vorgestellt und betrachtet.

Der Ansatz zur Approximation des Massen- und Wärmetransfers, unter der Annahme, dass der Momentenfluss über die Sektionsgrenzen für einen definierten Zeitraum vernachlässigbar klein ist, führt zu folgenden Gleichungen zur Beschreibung im DQMoM-Gleichungssystem (3.58). Für den Massentransfer ergibt sich:

$$a_{k,n}^{\text{mass}} = 0, \quad (3.61)$$

$$b_{k,n}^{\text{mass}} = w_{k,n} R_v(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n}, T_{k,n}), \quad (3.62)$$

$$c_{k,n}^{\text{mass}} = w_{k,n} u_{j,k,n} R_v(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n}, T_{k,n}), \text{ und} \quad (3.63)$$

$$d_{k,n}^{\text{mass}} = w_{k,n} T_{k,n} R_v(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n}, T_{k,n}). \quad (3.64)$$

Für den gekoppelten Wärmetransfer gilt entsprechend:

$$a_{k,n}^{\text{heat}} = b_{k,n}^{\text{heat}} = c_{k,n}^{\text{heat}} = 0, \quad (3.65)$$

$$d_{k,n}^{\text{heat}} = w_{k,n} v_{k,n} \theta(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n}, T_{k,n}). \quad (3.66)$$

Dies wiederum führt zu folgenden Gleichungen (3.67) und (3.68) zur Beschreibung der Veränderung des Volumens und der Temperatur auf der Abszisse [52]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(v_{k,n}) = R_v(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n}, T_{k,n}), \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(T_{k,n}) = \theta(v_{k,n}, \mathbf{u}_{k,n}, T_{k,n}). \quad (3.68)$$

Diese Gleichungen können direkt mit der Verdampfungsrate R_v und der Temperaturänderung θ approximiert werden, wobei eine zusätzliche Transportgleichung für den Abszissenwert der Temperatur nötig ist. Somit besteht die Möglichkeit ein realitätsnahes Verdampfungsmodell, z. B. das Modell von Abramzon und Sirignano, anstelle des ausschließlich oberflächenabhängigen d^2 -Modells ohne Berücksichtigung der Temperatur zu verwenden.

Im Rahmen der Approximation der Koaleszens innerhalb der DQbSMoM wird die Verteilungsfunktion f nicht zur Lösung der RHS in der Momententransformation berücksichtigt. Anstelle dessen wird eine ME-Rekonstruktion der NDF angewendet, um den Quellen- und Senkenterm Q_{coal}^+ und Q_{coal}^- numerisch zu integrieren – somit ist eine explizite Lösung des DQMoM-Systems ausgeschlossen. Eine Änderung der Tropfentemperatur wird in diesem Fall nicht betrachtet, was wiederum gleichbedeutend ist mit $\rho d_{k,n}^{\text{coal}} = 0$ (siehe Gl. (3.55)). Nach Gumprich et al. [53] liefert eine Momententransformation des transienten Terms der *Left Hand Side* (LHS) von Gleichung (3.43):

$$\begin{aligned} \int_{v_{k-1}}^{v_k} \int v^q u_1^l u_2^m u_3^p T^\theta \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) dv \, d\mathbf{u} \, dT = \\ = \sum_{n=1}^N (1-q) v_{k,n}^q u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^\theta a_{k,n} + \sum_{n=1}^N (q-l-m-p-\theta) v_{k,n}^{q-1} u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^\theta b_{k,n} + \\ + \sum_{n=1}^N v_{k,n}^{q-1} u_{k,n}^{l,m,p} T_{k,n}^\theta a_{k,n} \left(l u_{1,k,n}^{-1} c_{1,k,n} + m u_{2,k,n}^{-1} c_{2,k,n} + p u_{3,k,n}^{-1} c_{3,k,n} \right). \end{aligned} \quad (3.69)$$

Für die RHS ergeben sich mit der Aufteilung des Terms zur Beschreibung der Koaleszens $\Gamma = Q_{\text{coal}}^+ - Q_{\text{coal}}^-$ nach [52] die beiden numerisch zu integrierenden Ausdrücke:

$$\int_{v_{k-1}}^{v_k} \int v^q u_1^l u_2^m u_3^p (Q_{\text{coal}}^+ - Q_{\text{coal}}^-) dv \, d\mathbf{u} = Q_{k,\text{qlmp}}^+ - Q_{k,\text{qlmp}}^-. \quad (3.70)$$

Die numerische Integration wird in Kap. (3.2.4) näher erläutert, detailliertere Informationen sind [52] zu entnehmen. Die Häufigkeit binärer Kollisionen wird durch den zu definierenden Kollisions-Zylinder β bestimmt. Innerhalb des Kollisionszylinders werden die mögliche Position zweier Tropfen i und j , jeweils mit dem Radius r und den Geschwindigkeiten v_i und v_j , entsprechend nachfolgender Gleichung für den Querschnitt bestimmt:

$$\beta(v_i, v_j) = \pi (r(v_i) + r(v_j))^2 = \pi \left(\left(\frac{3v_i}{4\pi} \right)^{1/3} + \left(\frac{3v_j}{4\pi} \right)^{1/3} \right)^2. \quad (3.71)$$

Die Ausrichtung der Zylinderachse entspricht hierbei dem Vektor der Tropfen-Tropfen-Relativgeschwindigkeit $(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)$. Die Länge des Kollisions-Zylinders wird mit der Zeitschrittweite Δt bestimmt mit $(|\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j| \Delta t)$. Hieraus ergibt sich somit das Volumen des Zylinders von $\beta(v_i, v_j) |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j| \Delta t$. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Tropfen i und j während eines Zeitschritts Δt kollidieren, ist definiert durch das Verhältnis der Volumina des Kollisions-Zylinders zu dem die Tropfen umgebenden. Dies führt zu folgender volumenbasierter Formulierung einer Kollisionswahrscheinlichkeitsfunktion:

$$\nu(|\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|, v_i, v_j) = E_{\text{coll}}(|\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|, v_i, v_j) \beta(v_i, v_j) |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|. \quad (3.72)$$

E_{coll} beschreibt hierbei die sog. Stoß-Effizienz nach Oesterlé u. Petijean [91]. Mithilfe dieser Kennzahl wird bei der Berechnung der Kollisions-Wahrscheinlichkeit die Interaktion der Tropfen mit der umgebenden Gasphase berücksichtigt, Gumprich [52] schlägt im Rahmen der DQbSMoM eine Wahl von $E_{\text{coll}} = 1$ vor.

3.2.3 Transport im physikalischen Raum

Der Ansatz zur Beschreibung des Transports im physikalischen Raum basiert auf dem in Gleichung (3.31) beschriebenen Splitting der Operatoren und bietet die Möglichkeit der Kopplung mit den Multi-Fluid-Gleichungen der dispersen Phase (siehe Kapitel (2.2)). Die direkte Kopplung wird anhand der Darstellung des Volumenanteils $\alpha_{k,n}$ der Tropfen mit den Quadraturpunkten aus Gewichtung $w_{k,n}$ und konditionierten Tropfenvolumen $v_{k,n}$ möglich – somit sind die LHS der Gleichungen identisch. Ein Einsetzen von $w_{k,n} v_{k,n} = \alpha_{k,n}$ in Gleichung (3.34) und (3.35) führt zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \alpha_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_{k,n} u_{i,k,n}) = 0, \quad (3.73)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \alpha_{k,n} u_{j,k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_{k,n} u_{j,k,n} u_{i,k,n}) = \text{RHS}, \quad (3.74)$$

wobei für laminare Strömungen und bei Vernachlässigung des Einflusses des Diffusionsterms gilt:

$$\text{RHS} = \rho c_{j,k,n}^{\text{force}} = \rho \alpha_{k,n} \sum_i F_{j,i}. \quad (3.75)$$

Der Aspekt der Gültigkeit für turbulente Strömungen wird bei Gumprich [52, S. 46] diskutiert. Die Beschreibung der auf die Tropfen wirkenden Kräfte $F_{j,i}$ ist nachfolgendem Kapitel 3.2.3 zu entnehmen. Gumprich schlägt zudem im Rahmen der Multi-Fluid-Methode zur Beschreibung des Abszissenwerts des Tropfendurchmessers $d_{k,n}$ und der Temperatur $T_{k,n}$ die Lösung zweier zusätzlicher Skalgleichungen gemäß unten stehenden Gleichungen (3.76) und (3.77) vor:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \alpha_{k,n} d_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_{k,n} d_{k,n} u_{i,k,n}) = 0, \quad (3.76)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \alpha_{k,n} T_{k,n}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_{k,n} T_{k,n} u_{i,k,n}) = 0. \quad (3.77)$$

Der Einfluss des Durchmessers auf die Berechnung der wirkenden Kräfte rechtfertigt hierbei eine direkte Berechnung. Zudem wird somit eine höhere numerische Stabilität, sowie bessere Konvergenzeigenschaften der Simulation erreicht (siehe [52, S. 46]). Die direkte Berechnung des Abszissenwerts der Temperatur ermöglicht hierbei die Verwendung realitätsnaher, komplexer Modelle zur Beschreibung der Massen- und Wärmetransferprozesse. Bei Verwendung dieser skalaren Transportgleichungen wird die Gewichtung $w_{k,n}$ aus Gleichung (3.20) aus dem Durchmesser $d_{k,n}$ und dem konditionierten Volumenanteil $\alpha_{k,n}$ berechnet.

Auf die Tropfen wirkende Kräfte

Die in Gleichung (3.5) mit Term $\partial F_i f / \partial u_i$ beschriebene Veränderung der Drift-Geschwindigkeit nach [52, 79] ist verbunden mit den, auf einen Tropfen wirkenden, Kräften. Basierend auf dem Newtonschen Bewegungsgesetz wird F_i durch:

$$F_i = \frac{du_i}{dt} = \frac{1}{m_d} \sum_k F_{i,k} \quad (3.78)$$

ausgedrückt, wobei die im Rahmen der Modellierung betrachteten Einzelkräfte aufsummiert werden. Zu den Kräften zählen u. a. die Widerstandskraft, die Kraft aufgrund eines Druckgradienten, die Gravitationskraft, die Buoyant-Kraft, die virtuelle Massenkraft und die Basset-Kraft. Erwähnenswert ist, dass im Kontext einer Modellierung von verdünnten und dünnen Spray-Systemen lediglich die Widerstands-

und die Gravitationskraft einen nennenswerten Einfluss auf die Tropfen haben und die anderen o. g. Kräfte aufgrund des großen Dichteunterschieds zwischen kontinuierlicher und disperser Phase ($\rho_d \gg \rho_g$) vernachlässigbar klein sind.

Strömungswiderstandskraft

Ein sich relativ zur kontinuierlichen Phase bewegender Tropfen erfährt eine, der Relativgeschwindigkeit entgegengesetzt wirkende, Kraft in Form des Strömungswiderstands. Der Strömungswiderstand wird hierbei in Abhängigkeit der Tropfenoberfläche bestimmt:

$$F_{i,\text{drag}} = m_d \frac{3}{4} \frac{C_D}{\rho_d d^2} Re_d \mu_g u_{i,\text{rel}}. \quad (3.79)$$

Der Widerstandskoeffizienten C_D in Gl. (3.79) wird anhand der Tropfen-Reynolds-Zahl wie folgt bestimmt:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} & \text{sofern } Re_d \leq 0,5, \\ \frac{24}{Re_d} \left(1 + 0,15 Re_d^{2/3}\right) & \text{sofern } 0,5 < Re_d \leq 10^3, \text{ und} \\ 0,44 & \text{sofern } Re_d > 10^3. \end{cases} \quad (3.80)$$

Im vorliegenden Fall ist der Widerstandskoeffizient (3.80) überwiegend auf den Bereich $Re_d \leq 10^3$ beschränkt. Eine Reduktion der Strömungswiderstandskraft muss jedoch bei Spray-Systemen mit sehr kleinen Tropfen oder bei Systemen mit niedrigem Umgebungsdruck berücksichtigt werden.

Ein Fluid mit $u_i > 0$ kann unter der Voraussetzungen stetiger thermodynamischer Größen im gesamten Rechengebiet mit den Methoden der »Kontinuumsströmung« beschrieben werden. Innerhalb einer Kontinuumsströmung erfolgt die mathematische Beschreibung der Strömung nicht mikroskopisch, d. h. nicht anhand jedes einzelnen Tropfens, sondern makroskopisch anhand der Mittelwerte mikroskopischer Größen wie Masse, Impuls und Enthalpie. Kontinuumsströmungen lassen sich mithilfe der Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben. Die Voraussetzung der Kontinuumsannahme wird anhand der Knudsen-Zahl Kn auf ihre Gültigkeit überprüft, wobei diese dimensionslose Kennzahl (3.81) ebenfalls ein Maß für den »Verdünnungs-Effekt« darstellt:

$$Kn = \frac{\lambda_\ell}{d}. \quad (3.81)$$

Hierbei gibt λ_ℓ die mittlere freie Weglänge eines Tropfens an, bevor dieser in Wechselwirkung mit einem anderen Tropfen, z. B. durch einen Zusammenstoß, tritt. Bei Gasen sollten die charakteristischen Abmessungen eines Strömungsgebietes – im Falle eines Sprays der Tropfendurchmesser d – deutlich größer als die sogenannte mittlere freie Weglänge λ_ℓ sein. Die Weglänge λ_ℓ wird wie folgt berechnet:

$$\lambda_\ell = \frac{\mu_g}{0,499 \bar{c}_{\text{Mol}} \rho_g}, \quad (3.82)$$

wobei \bar{c}_{Mol} die relative Geschwindigkeit zwischen den Gasmolekülen angibt:

$$\bar{c}_{\text{Mol}} = \sqrt{\frac{8p}{\pi \rho_g}}. \quad (3.83)$$

Sofern die Knudsen-Zahl einem Wert von $Kn > 10^{-3}$ entspricht, ist die Kontinuumsannahme gemäß Crowe et al. nicht mehr gültig und der Widerstandskoeffizient wird in Abhängigkeit des Cunningham-Korrekturfaktors angegeben:

$$C_D = \left(\frac{24}{Re_d} \right) \frac{1}{C_u}. \quad (3.84)$$

Zur Bestimmung des Korrekturfaktors C_u werden im Folgenden zwei Möglichkeiten gemäß [52] dargestellt:

$$C_u = \begin{cases} 1 + Kn_d \left(2,49 + 0,84 e^{-(1,74/Kn_d)} \right), \\ 1 + Kn_d \left(2,514 + 0,84 e^{-(0,55/Kn_d)} \right). \end{cases} \quad (3.85)$$

Zusätzlich können Kompressibilitätseffekte eine Erhöhung der Widerstandskraft hervorrufen, diese werden im Rahmen vorliegender Arbeit jedoch nicht betrachtet, da beide Phasen als inkompressibel angesehen werden.

Kraft aufgrund eines Druckgradienten

Ein in Gleichung (3.5) auftretender Druckgradient übt auf die projizierte Tropfenfläche eine Kraft (3.86) mit dispersivem Charakter aus:

$$F_{i,\text{pressure}} = -m_d \frac{1}{\rho_d} \frac{\partial p}{\partial x_i}. \quad (3.86)$$

Sofern eine Simulation unter der Annahme eines konstanten Drucks $p = \text{const.}$ durchgeführt wird, kann die Kraft aufgrund des Druckgradienten vernachlässigt werden.

Gewichtskraft

Durch die Wirkung des Erdschwerefelds resultiert eine proportional zur Masse m_d wirkende Kraft (3.87) auf einen Tropfen:

$$F_{i,\text{gravity}} = m_d g_i. \quad (3.87)$$

Insbesondere der Aspekt der natürlichen Konvektion in einer Strömung beruht auf der Gewichtskraft.

Auftriebskraft

Die Auftriebskraft wirkt der Gravitationskraft entgegen und ergibt sich aus dem verdrängten Gewicht der umgebenden, kontinuierlichen Phase:

$$F_{i,\text{buoyant}} = -m_d \frac{\rho_g}{\rho_d} g_i. \quad (3.88)$$

Unter der Annahme stark variierender Dichten der kontinuierlichen und dispersen Phase $\rho_d \gg \rho_g$ ist die Auftriebskraft nach [52] vernachlässigbar klein.

Virtuelle Massenkraft

Im Falle der Beschleunigung eines Tropfens wird die umgebende kontinuierliche Phase aufgrund der Haftbedingung an der Tropfenoberfläche ebenfalls eine Beschleunigung erfahren. Die hinsichtlich der

zusätzliche Masse aufzuwendende Kraft wird daher als virtuelle Massenkraft bezeichnet. Ein Ausdruck für diese Kraft ist gegeben durch Gleichung (3.89):

$$F_{i,\text{vmf}} = C_A m_d \frac{1}{2} \frac{\rho_g}{\rho_d} \frac{d}{dt} (u_{i,g} - u_{i,d}) . \quad (3.89)$$

C_A gibt hierbei einen empirischen, dimensionslosen Koeffizienten an, in der Literatur wird zumeist ein Wert von $C_A = 0,5$ angegeben. Ist der Quotient aus der Dichte der kontinuierlichen und der dispersen Phase hinreichend klein, ist eine Vernachlässigung der virtuellen Massenkraft rechtfertigbar.

Basset-Kraft

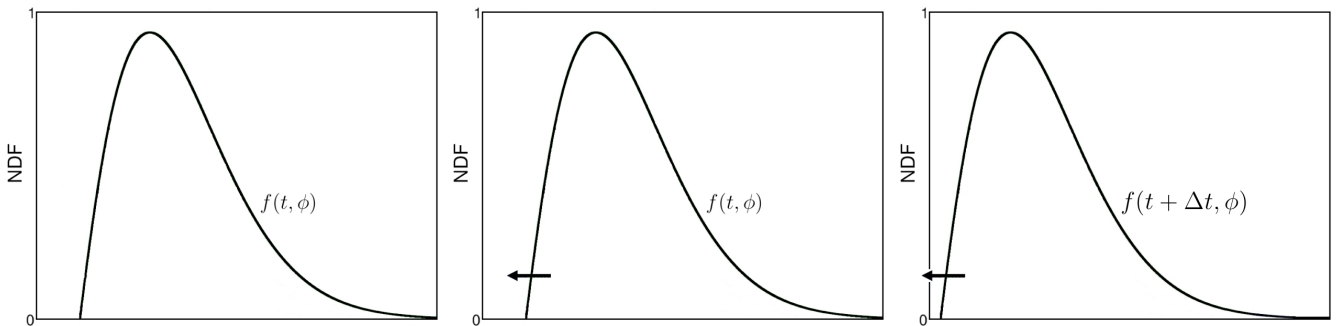
Die Basset-Kraft wird durch eine instationäre Beschleunigung der umgebenden, kontinuierlichen Phase hervorgerufen. Während dieser Beschleunigung ist die Ausbildung und somit auch das Volumen der, den Tropfen umgebenden, Grenzschicht einer ständigen Veränderung unterworfen und führt zur Basset-Kraft:

$$F_{i,\text{basset}} = \frac{3}{2} d^2 \sqrt{\pi \rho_g \mu_d} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{t-t'}} \frac{d}{dt} (u_{i,g} - u_{i,d}) dt . \quad (3.90)$$

Die Basset-Kraft hängt somit von der zeitlichen Entwicklung der Relativbewegung zwischen kontinuierlicher und disperser Phase ab und berücksichtigt die Veränderung des aktuellen Widerstandes durch bereits vergangene Vorgänge.

3.2.4 Transport im phasenbasierten Raum

Aus dem Splitting der Operatoren, beschrieben anhand von Gleichung (3.32), resultiert auch eine Beschreibung des Transports im phasenbasierten Raum. Die Modellierungsansätze für den Vorgang der Verdampfung und der Koaleszens werden in diesem Raum beschrieben, wobei insbesondere die Verdampfung eines polydispersen Sprays mit dem EMSM-Modell relevant für das implementierte Verdampfungsmodell ist und im Folgenden vorgestellt wird. Die Koaleszens von Tropfen wird wiederum mit einem neuartigen, statistischen Ansatz von Gumprich [52] beschrieben. Die massentransferbedingte konventionelle Verschiebung der Verteilungsfunktion ist in Abb. 3.6 dargestellt.



(a) Verteilungsfunktion $f(t, \phi)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ **(b)** Verdampfungsbedingte Verschiebung von $f(t, \phi)$ **(c)** Abgeschlossene Verschiebung von $f(t + \Delta t, \phi)$ zum Zeitpunkt $t + \Delta t$

Abbildung 3.6: Konventionelle, massentransferbedingte Verschiebung der Verteilungsfunktion zum Zeitpunkt t (a), bzw. (b) und $t + \Delta t$ (c).

Die DQbSMoM ist eine hybride Methode, die die Effizienz der DQMoM mit der Beschreibung des Flusses der Momente über die Sektionsgrenzen entsprechend dem EMSM-Modell nach Massot et al. [82] verbindet. Im Folgenden wird die Modellierung des Massen- und Wärmetransfers mit dem EMSM-Modell, sowie der EMSM-Algorithmus selbst vorgestellt. Im Rahmen des EMSM-Algorithmus findet eine Rekonstruktion der NDF mit der Methode der maximalen Entropie Anwendung. Um die Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten, werden die sog. »Kanonischen Momente« zur Beschränkung des Momentenflusses eingeführt. Die massentransferbedingte Translation der NDF auf der Abszisse wird bei diesem Ansatz nach wie vor mit der DQMoM beschrieben.

Modellierung des Massen- und Wärmetransfers mit dem EMSM-Algorithmus

Folgendes triviales Problem der Veränderung des charakteristischen Längemaßes ϕ sei als Beispiel für die Wirkungsweise des EMSM-Modells aufgeführt:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \phi} (R_\phi f). \quad (3.91)$$

ϕ bezeichnet hierbei die charakteristische Tropfengröße und $R_\phi = d\phi/dt$ die konstante und positive Verdampfungsrate. Eine analytische Lösung obiger Gleichung führt auf:

$$f(t, \phi) = \psi(t) \delta(\phi - R_\phi t), \quad (3.92)$$

mit einem positiven Anfangswert für $f^0(\phi)$ auf dem Intervall $[0, \infty)$. Der Koeffizient ψ bezeichnet hierbei die in der Zeit t verdampfte Menge an Tropfen und wird wie folgt berechnet:

$$\psi(t) = \int_0^{-R_\phi t} f^0(\phi) d\phi. \quad (3.93)$$

Eine Anwendung der DQMoM auf Gleichung (3.91) führt auf die explizite Beschreibung innerhalb eines Zeitschritts Δt . Für die Veränderung des Abszissenwerts von ϕ folgt:

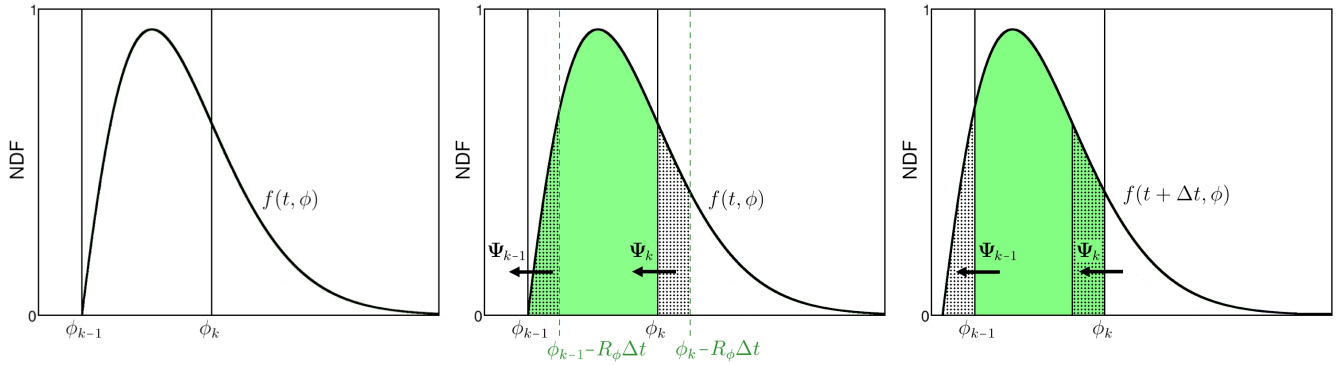
$$\phi_n(t + \Delta t) = R_\phi \Delta t + \phi_n(t). \quad (3.94)$$

Der Ansatz des EMSM-Modells ist die bereits erwähnte separate Beschreibung des Momentenflusses über die Sektionsgrenzen anhand eines modifizierten Momentenvektor M^* . Der modifizierte Momentenvektor $M_{\phi_k}^*$ wird entsprechend der Unterteilung der NDF in die Sektionen $I_k = [\phi_{k-1}, \phi_k)$ durch Ausdruck (3.95) dargestellt, wobei ψ_{k-1} und ψ_k die Momentenflüsse über die untere und obere Sektionsgrenzen bezeichnen:

$$M_{\phi_k}^* = M_{\phi_k} - \psi_{k-1} + \psi_k. \quad (3.95)$$

Dabei kann der Momentenfluss ψ nicht anhand der Quadraturpunkte oder der bekannten Momente der NDF bestimmt werden. Im Rahmen der Simulationen entspricht der in Sektion I_k austretende dem in Sektion I_{k-1} eintretenden Momentenfluss.

Die EMSM-Methode beinhaltet darüber hinausgehend zwei weitere Modellierungsannahmen, welche im Folgenden vorgestellt werden [49, 52, 53]. Die Rekonstruktion der NDF wird mithilfe der Methode der ME durchgeführt. Die numerische Stabilität des Verfahrens der Bestimmung der Momentenflüsse über die Sektionsgrenzen wird durch die Verwendung sog. kanonischer Momente gewährleistet. Eine Darstellung



(a) Unterteilung der Verteilungsfunktion $f(t, \phi)$ mit den Sektionsgrenzen ϕ_{k-1} und ϕ_k . (b) Verschiebung der Verteilungsfunktion $f(t, \phi)$ über die obere und untere Sektionsgrenzen. (c) Abgeschlossene Verschiebung von $f(t + \Delta t, \phi)$ mit den Momentenflussvektoren ψ_{k-1} und ψ_k .

Abbildung 3.7: Massentransferbedingte Verschiebung der Verteilungsfunktion über die Sektionsgrenzen unter Berücksichtigung des EMSM-Algorithmus zum Zeitpunkt t (a), (b) und $t + \Delta t$ (c).

der Modellierungsstrategie des Massentransferprozesses einer konventionellen DQMoM ist Abb. 3.6 zu entnehmen, die Strategie einer DQbSMoM wiederum ist in Abb. 3.7 schematisch abgebildet.

EMSM-Algorithmus

Abschließend wird der Algorithmus der EMSM-Methode beschrieben. Im Gegensatz zur Kopplung der DQMoM- mit dem Multi-Fluid-Ansatz (auf $\phi = v$ basierend) im physikalischen Raum wird aus Aspekten der Konsistenz mit der Modellierung der beschriebenen Verdampfungsmodelle im phasenbasierten Raum folgende Berechnungsvorschrift zur Darstellung der Tropfenoberfläche angewendet ($\phi = S$). Dieser Schritt ist insofern vorteilhaft, da die Veränderung des Durchmessers eines Tropfens, siehe Gl. (3.113), abhängig von der Tropfenoberfläche ist. Gleiches gilt für die Veränderung der Tropfentemperatur, siehe hierzu Gl. (3.114).

Für die Anzahl N_s an Sektionen ergibt sich in Abhängigkeit der Tropfenoberfläche für $I_k = [s_{k-1}, s_k)$, ($k = 1, \dots, N_{s-1}$) und $I_{N_s} = [s_{N_{s-1}}, \infty)$ mit $s_0 = 0$ nach Gumprich [52, S. 51] folgender Algorithmus für jedes KV und jeden Zeitschritt Δt mit einer Schleife über alle Sektionen k von $k = N_s$ bis $k = 1$:

1. Berechnung des Momentenvektors der Oberfläche $\mathbf{M}_{s,k}$ aus der Gewichtung $w_{k,n}$ und der Durchmesser-Abszisse $d_{k,n}$;
2. Berechnung der Verdampfungsrate R_s an der unteren Grenzen der Sektion k und Bestimmung von $s_{\Delta t} = -R_s \Delta t + s_{k-1}$;
3. Rekonstruktion der NDF mit den Momenten $\mathbf{M}_{s,k}$ unter Anwendung der ME-Methode, numerische Integration des Momentenflussvektors:

$$\Psi_{k-1}(\Delta t) = \int_{s_{k-1}}^{s_{\Delta t}} f_{\mathbf{M}_{s,k}}^{\text{ME}}(s) \begin{bmatrix} 1 \\ s \\ \vdots \\ s^{2N} \end{bmatrix} ds; \quad (3.96)$$

4. Berechnung des modifizierten Momentenvektors:

$$\mathbf{M}^* = \mathbf{M}_{s,k} - \Psi_{k-1} + \Psi_k, \quad \text{mit} \quad \Psi_{N_s} = 0; \quad (3.97)$$

5. Bestimmung der Gewichtungen $w_{k,n}$ und Abszissenwerte $s_{k,n}$ des modifizierten Momentenvektors \mathbf{M}^* unter Anwendung des PD-Algorithmus
6. Berechnung der Verdampfungsrate R_S und der Änderung der Temperatur θ für jeden Abzissenwert $s_{k,n}$ mit der konditionierten Temperatur $T_{k,n}$;
7. Verschiebung der Abszisse: $s_{k,n}(t + \Delta t) = R_S \Delta t + s_{k,n}(t)$ und $T_{k,n}(t + \Delta t) = \theta \Delta t + T_{k,n}(t)$;
8. Bestimmung von $d_{k,n}$ anhand von $s_{k,n}$;
9. Berechnung der Veränderung des Massenanteils von verdampften Brennstoff Y_∞ entsprechend unten stehender Gleichung.

Die Ansätze zur Approximation der Veränderung des Massenanteils von verdampftem Brennstoff Y_∞ sind nach Gumprich [52] definiert als:

$$m_{\text{mix}} = m_{\text{gas}} + m_{\text{vap}} = (1 - Y_\infty)m_{\text{mix}} + Y_\infty m_{\text{mix}} \quad , \text{ bzw. } m_{\text{mix}} = \frac{m_{\text{gas}}}{(1 - Y_\infty)} \approx \frac{\rho_g \alpha_g}{1 - Y_\infty} \delta V . \quad (3.98)$$

Dabei bezeichnet m_{mix} das Gemisch, m_{gas} die Gasphase und m_{vap} den verdampften Brennstoff. Nach einem Zeitschritt Δt ergibt sich daher:

$$Y_\infty(t + \Delta t) = \frac{m_{\text{vap}}(t) + \Psi_{\text{flux}}}{m_{\text{gas}}(t) + m_{\text{vap}}(t) + \Psi_{\text{flux}}} = \frac{Y_\infty(t) \rho_g \alpha_g(t) / (1 - Y_\infty(t)) + \Psi_{\text{flux}}}{\rho_g \alpha_g(t) / (1 - Y_\infty(t)) + \Psi_{\text{flux}}} . \quad (3.99)$$

Ψ_{flux} bezeichnet die während eines Zeitschritts Δt entstehende Masse von verdampftem Brennstoff.

NDF-Rekonstruktion mit der Methode der maximalen Entropie

Die Rekonstruktion der NDF erfolgt mittels der ME-Methode nach Mead u. Papanicolaou [85] bzw. Massot et al. [82] und wird von Gumprich [52] wie folgt für den Momentenvektor $\mathbf{M} = m_0, \dots, m_{2N}$ beschrieben:

$$f_{\mathbf{M}}^{\text{ME}}(\phi) = \exp \left(- \sum_{j=0}^{2N} \xi_j \phi^j \right) , \quad (3.100)$$

wobei $\xi_j (j = 0, \dots, 2N)$ die Lagrangeschen Multiplikatoren angibt. Die Lagrange-Multiplikatoren-Regel ist in eine mathematische Methode um Optimierungsprobleme mit Nebenbedingungen umzuformulieren. Ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen dient dazu, ein lokales Extremum einer Funktion mit mehreren Veränderlichen unter Beachtung der formulierten Nebenbedingungen zu finden. Die Nebenbedingungen werden mithilfe von Skalaren definiert. Im Rahmen dieser Methode wird für jede skalare Nebenbedingung eine neue unbekannte skalare Variable, der Lagrange-Multiplikator, eingeführt und eine die Multiplikatoren einbindende Linearkombination definiert. Dieser Schritt reduziert das Nebenbedingungsproblem auf ein Problem ohne Nebenbedingung, welches beispielsweise mit einem Gradientenverfahren, im vorliegenden Fall mit einem iterativen Newton-Verfahren, gelöst werden kann. Das Optimierungsproblem bezieht sich im Rahmen der ME-Methode auf die Minimierung des folgenden konvexen Potentials Δ :

$$\Delta = \int_{\phi_{\min}}^{\phi_{\max}} \left(\exp \left(- \sum_{j=0}^{2N} \xi_j \phi^j \right) - 1 \right) d\phi + \sum_{j=0}^{2N} \xi_j m_j . \quad (3.101)$$

Als Lösungsansatz wird ein iteratives Newton-Verfahren mit den Anfangswerten $\Xi^0 = (\xi_0, \dots, \xi_{2N})$ angewendet:

$$\Xi^{n+1} = \Xi^n - \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{M} - \langle \Phi \rangle_{\Xi}), \quad (3.102)$$

wobei für $\langle \Phi \rangle_{\Xi} = (\langle \phi^0 \rangle_{\Xi}, \dots, \langle \phi^{2N} \rangle_{\Xi})$ gilt. \mathbf{H} repräsentiert die Nebenfunktion in Form einer Hesse-Matrix; für diese Matrix gilt $\mathbf{H} = \partial^2 \Delta / \partial \xi_i \partial \xi_j = \langle \phi^{i+j} \rangle_{\Xi}$ mit $i, j = 0, \dots, 2N$. Hieraus folgt der Vektor der approximierten Momente:

$$\langle \phi^i \rangle_{\Xi} = \int_{\phi_{\min}}^{\phi_{\max}} \phi^i \exp\left(-\sum_{j=0}^{2N} \xi_j \phi^j\right) d\phi. \quad (3.103)$$

Eine detaillierte Diskussion zur Wahl der Randbedingung ist bei [52, S. 48] zu entnehmen, wobei Gumprich $\Xi^0 = (0, \dots, 0)$ für die Simulationen vorschlägt. Die Gewichtung $w_{k,n}$ und die Tropfengröße $d_{k,n}$ werden anschließend mit dem neuen Momentenvektor berechnet.

Kanonische Momente

Aus den Stabilitätsanforderungen resultiert die Verwendung der kanonischen Momente. Kanonische Momente stehen in enger Verbindung mit den Momentenmethoden und basieren auf einem skalaren Wahrscheinlichkeitsmaß in einem zu definierenden Momentenraum auf einem beschränkten Intervall. Anwendungsbezogen bedeutet das, dass bei Über- oder Unterschreiten eines, auf die kanonischen Momente bezogenen, Maximalwerts der Momentenfluss über eine Sektionsgrenze I_k nicht berechnet wird. Detaillierte Erläuterungen der kanonischen Momente sind bei Massot et al. [82] und Gumprich [49, 52] zu finden. Die Definition des N ten Momentenraums \mathcal{M}_N lautet:

$$\mathcal{M}_N = \{\mathbf{c}_N(\eta) | \eta \in \mathcal{P}\}. \quad (3.104)$$

\mathcal{P} kennzeichnet hierbei die Menge der Wahrscheinlichkeitsmaße η auf dem Intervall $[0; 1]$, deren Momente bis zur Ordnung n mit $\mathbf{c}_n = (c_1, \dots, c_n)$ mit den Bedingungen $\mathcal{M}_N \subset [0; 1]^N$ und $c_0 = 1$ übereinstimmen:

$$\mathbf{c}_N(\eta) = (c_1(\eta), \dots, c_N(\eta)) \quad , \text{ wobei } \quad c_i(\eta) = \int_0^1 x^i d\eta(x). \quad (3.105)$$

Für die kanonischen Momente $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3, \dots)$ wird ein minimaler Wert derart definiert, so dass c_1, \dots, c_{N_c} auf der Grenze von \mathcal{M}_{N_c} liegen. Diese Formulierung lässt sich mithilfe von Gleichung (3.106) darstellen:

$$N_c = \min\{n \in \mathbb{N} | (c_1, \dots, c_n) \in \partial \mathcal{M}_{N_c}\}. \quad (3.106)$$

Mit den Bedingungen, dass $N_c = 1$ gilt, wenn $c_1 \in \partial \mathcal{M}_1$ entspricht, sowie dass $N_c = \infty$ gilt, sobald (c_1, \dots, c_n) im Inneren von \mathcal{M}_n liegt für $n \geq 1$. Zusätzlich sind zwei weitere Bedingungen relevant; zum einen gilt für $n < N_c$ mit c_1, \dots, c_n im Inneren von \mathcal{M}_n und $(c_1, \dots, c_{N_c}) \in \partial \mathcal{M}_{N_c}$ und zum anderen gilt für $n > N_c + 1$ mit $(c_1, \dots, c_n) \in \partial \mathcal{M}_n$. Der Minimal- und Maximalwert des $(n + 1)$ ten Moments über $\mathcal{P}(\mathbf{c}_n)$ entspricht:

$$c_{n+1}^- = \min \left\{ \int_0^1 x^{n+1} d\eta(x) \quad | \quad \eta \in \mathcal{P}(\mathbf{c}_n) \quad \text{mit} \quad c_i = \int_0^1 x^i d\eta(x) \quad \forall i = 1, \dots, n \right\}, \quad (3.107)$$

$$c_{n+1}^+ = \max \left\{ \int_0^1 x^{n+1} d\eta(x) \quad | \quad \eta \in \mathcal{P}(\mathbf{c}_n) \quad \text{mit} \quad c_i = \int_0^1 x^i d\eta(x) \quad \forall i = 1, \dots, n \right\}, \quad (3.108)$$

für jedes $n \in \mathbb{N}_0$. Die Definition der kanonischen Momente für $n \leq N_c$ entspricht:

$$p_n = \frac{c_n - c_n^-}{c_n^+ - c_n^-}, \quad (3.109)$$

die kanonischen Momente variieren hierbei im Intervall $[0; 1]$. Für $N_c < \infty$ gilt $p_i \in (0, 1)$, sofern $1 \leq i < N_c$ und $p_{N_c} \in \{0, 1\}$. Demnach werden die kanonischen Momente angewendet um zu bestimmen, ob ein Momentenvektor \mathbf{c}_n auf der Grenze oder zu nah an der Grenze des n ten Momentenraums $\partial \mathcal{M}_n$ liegt. Der Momentenvektor der NDF im Intervall $[\phi_{\min}, \phi_{\max})$ ist gegeben durch $\mathbf{M} = (m_0, m_1, \dots, m_n)$ mit $\mathbf{M} \in \mathcal{M}_n(\phi_{\min}, \phi_{\max})$, wobei $\mathcal{M}_n(\phi_{\min}, \phi_{\max})$ den n ten Momentenraum des Intervall $[\phi_{\min}, \phi_{\max})$ angibt. Im Falle der EMSM-Methode werden die ersten drei kanonischen Momente wie folgt berechnet:

$$p_1 = \frac{m_1 - \phi_{\min} m_0}{(\phi_{\max} - \phi_{\min}) m_0}, \quad (3.110)$$

$$p_2 = \frac{m_0 m_2 - m_1^2}{(m_1 - \phi_{\min} m_0)(\phi_{\max} m_0 - m_1)}, \text{ und} \quad (3.111)$$

$$p_3 = \frac{(\phi_{\max} m_0 - m_1)((m_1 - \phi_{\min} m_0) m_3 - (m_2 - \phi_{\min} m_1 - \phi_{\min}^2 m_0) m_2 - \phi_{\min}^2 m_1^2)}{(\phi_{\max} - \phi_{\min})(m_0 m_2 - m_1^2)((\phi_{\max} + \phi_{\min}) m_1 - m_2 - \phi_{\max} \phi_{\min} m_0)}. \quad (3.112)$$

Entsprechen die kanonischen Momente $p_n < 0,01$ oder $p_n > 0,99$, wird der verdampfungsbedingte Momentenfluss über die Sektionsgrenze nicht berechnet.

Modellierung des Massen- und Wärmetransfers

Zur Modellierung des Wärme- und Massentransfers stehen nach Sazhin [110], bzw. Chrigui [17] folgende allgemeine Modellierungsansätze auf unterschiedlichen Hierarchieebenen zur Verfügung. Die Unterscheidungsmerkmale beziehen sich hierbei auf die Bestimmung der Tropfen- und Tropfenoberflächentemperatur, sowie die Ausbildung von Fluidbewegungen innerhalb der Tropfen. Eine radiusabhängige Veränderung der Tropfentemperatur ist u. A. zurückführbar auf konduktive Wärmeleitung, sowie auf die interne Rezirkulation der dispersen Phase. Insbesondere zur Beschreibung der Rezirkulation existieren eine Vielzahl von Ansätzen, deren Betrachtungsweise dem mikroskopischen Bereich zuzuordnen ist. Diese Betrachtungen werden zumeist mit dem Ansatz der DNS oder der LES für Einzeltropfen durchgeführt, und zeichnen sich durch ihre Eignung für Validierungsrechnungen aus. Eine kommerzielle Anwendung für Spray-Systeme ist vielfach aufgrund der Rechenzeit zumeist ausgeschlossen. Nachfolgend sind die Modellierungsansätze mit den jeweiligen charakteristischen Merkmalen beschrieben und entsprechend des Modellierungsaufwands aufgelistet:

Modelle mit konstanter Tropfentemperatur – Sowohl die Temperatur des Tropfens, als auch die Temperatur der Tropfenoberfläche unterliegen keiner zeitlichen Änderung, diese Annahme führt z. B. auf das bekannte d^2 -Verdampfungsmodell [87].

Infinite-Konduktions-Modelle – Die Temperatur innerhalb des Tropfens und die Temperatur der Tropfenoberfläche sind gleich, jedoch zeitabhängig. Dem Infiniten-Konduktion-Modell liegt die Annahme zugrunde, dass die Zeitskalen der Transportprozesse von Masse und Wärme so gering sind, dass die physikalischen Eigenschaften und die chemische Zusammensetzung im betrachteten Zeitraum innerhalb des Tropfens einheitlich sind.

Finite-Konduktions-Modelle – Diese Modelle stellen bedingt durch eine separate Berechnung der Tropfenoberflächentemperatur, eine Erweiterung Infiniten-Konduktions-Modelle dar.

Effektive-Konduktions-Modelle – Im Rahmen der Effektiven-Konduktions-Modelle erfolgt Betrachtung der Rezirkulation und endlicher Konduktivität innerhalb der dispersen Phase. Aufgrund der Rezirkulation wird die Effektivität der Wärmeleitung zusätzlich verstärkt. Es werden zumeist vereinfachte Gleichungen zur Darstellung der Zirkulation berücksichtigt, das Modell ist auf eine Optimierung der Rechenzeit ausgerichtet.

Sphärische-Tropfen-Modelle – Bei diesen Modellen erfolgt eine Berücksichtigung der finiten thermischen Konduktivität innerhalb des Tropfens, der Stofftransport wird durch die molekulare Diffusion dominiert und die Tropfentemperatur ist sphärisch-symmetrisch verteilt.

Wirbel-Modelle – Wirbel-Modelle berücksichtigen eine instationäre und axialsymmetrische Zirkulation des flüssigen Brennstoffs anhand von Wirbelbewegungen. Die Wirbelbewegung innerhalb eines Tropfens wird durch zusätzliche Verwirbelungs- und Strömungsfunktionen, oder durch analytische Lösungen einschließlich der Auswirkungen von Diffusion und Konvektion beschrieben [129].

Aufgrund der detaillierten Beschreibungsweise und nicht zuletzt des hohen numerischen Aufwands sind viele der oben genannten Modelle lediglich für die Verdampfung von Einzeltropfen und zur Validierung weniger detaillierter Modellierungsansätze geeignet. Für die Anwendung in realen Spray-Systemen mit polydisperser Tropfenverteilung, in denen die Berechnungszeit eine relevante Rolle spielt, werden zumeist weniger komplexe Modelle angewendet.

Im Kontext des momentenbasierten Berechnungsansatzes sind zudem nicht alle eingangs beschriebenen physikalischen Eigenschaften, wie z. B. eine detaillierte Vorhersage der Zirkulation des Brennstoffs, darstellbar. Eine mögliche Beschreibung des radialen Temperaturprofils, wie sie Miller et al. [87] vorschlagen, basiert zudem auf teils analytischen, teils empirischen Ansätzen. Miller et al. [87] haben, in der von ihnen vorgestellten Veröffentlichung zur Verifizierung und Validierung bestehender Verdampfungsmodelle, auf Basis eines Euler-Lagrange-Modellansatzes, zweidimensionale Berechnungen für Tropfen mit verschiedenen Durchmessern bei atmosphärischem Umgebungsdruck durchgeführt. Im Fokus der Berechnungen steht der Massen- und Wärmetransfer von Wasser-, Benzol-, Dekan-, Heptan- und Hexan-Tropfen bei hohen Umgebungstemperaturen, wie sie in vielen Spray-Systemen, insbesondere unter Berücksichtigung von Verbrennungsprozessen, auftreten. Neben der Bestimmung von Einflussfaktoren auf die Verdampfungsrate werden Formulierungen bezüglich des Phasengleichgewichts an der Tropfenoberfläche getroffen und im Folgenden Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsformulierungen einander gegenüber gestellt. Aufgrund der Übereinstimmung mit den verwendeten experimentellen Daten zeigen die Autoren, dass Nicht-Gleichgewichts-Effekte bei einem Anfangsdurchmesser von weniger als 5 m^{-7} , sowie bei hoher Relativgeschwindigkeit an Relevanz gewinnen. Basierend auf dieser Veröffentlichung haben Shashank et al. [115] eine Sensitivitätsstudie zum weitertreichenden Verständnis der Auswirkungen einzelner Faktoren durchgeführt.

Folgende vereinfachende Annahmen werden für die Modellierung des Massen- und Wärmetransfers bei der Simulation polydisperser Spray-Konfigurationen getroffen, um den Rechenaufwand und die benötigte Rechenzeit zu begrenzen [57]:

- Sphärizität des Tropfens während des Massen- und Wärmetransfersprozesses,
- Vernachlässigung des Sekundärzerfalls,
- Vernachlässigung der Oberflächenspannungen,
- Gleichbleibender Druck der kontinuierlichen Phase,
- Unlöslichkeit der kontinuierlichen Phase in der dispersen Phase,
- Konstante Dichte der dispersen Phase,
- Vernachlässigung des Soret- und des Dufour-Effekts.

Basierend auf der Williams-Spray-Gleichung (3.5) wird aus Konsistenzgründen mit der Modellierung der Massen- und Wärmetransfermechanismen im Rahmen der DQbSMoM (Kap. 3.2) die Verdampfungsrate $R_\phi - \phi$ bezeichnet hierbei ein charakteristisches Größenmaß des Tropfens – in einen tropfenoberflächenabhängigen Ausdruck R_s überführt. Die Wahl dieses Ansatzes zur Beschreibung des Wärme- und Massentransfers liegt darin begründet, dass die Phänomene ausschließlich an der Tropfenoberfläche stattfinden. Die Veränderung der Tropfenoberfläche R_s wird entsprechend [87] wie folgt modelliert:

$$R_s = -\frac{dS}{dt} = \frac{4}{\rho_d d} \frac{Sh}{3 Sc_g} \left(\frac{m_d}{\tau_d} \right) H_M. \quad (3.113)$$

R_s wird maßgeblich vom konvektiven Massentransfer, dem Stoffaustauschpotential aufgrund der Verdampfung H_M , sowie der Diffusion bestimmt. Die Formulierung der Veränderung der Tropfentemperatur θ ist ebenfalls von Miller et al. übernommen und entspricht:

$$\theta = \frac{dT_d}{dt} = \frac{f_2 Nu}{3 Pr_g} \frac{\theta_1}{\tau_d} (T_g - T_d) + \frac{L_v}{c_{p,d}} \frac{\dot{m}_d}{m_d} - H_{\Delta T}. \quad (3.114)$$

Der erste Term der rechten Seite dieser Gleichung (3.114) beschreibt die Veränderung der Tropfentemperatur aufgrund von Konvektion, der zweite Term die Veränderung aufgrund der Verdampfung und $H_{\Delta T}$ interne Temperatureffekte. Die Gleichungen (3.113) und (3.114) beschreiben eine allgemeine Modellierungsstrategie. Die von Miller et al. vorgestellten Modelle unterscheiden sich jeweils anhand der Berechnung des Korrekturterms f_2 , der dimensionlosen Nusselt- und Sherwood-Zahl, sowie des Stoffaustauschpotentials H_M . Im Rahmen dieser Arbeit wird das Gleichgewichtsmodell von Abramzon und Sirignano [4], sowie ein Nicht-Gleichgewichtsmodell von Langmuir-Knudsen Harstad u. Bellan [54] vorgestellt, siehe Tabelle 3.2. Beide Modelle berücksichtigen keinerlei interne Temperatureffekte $H_{\Delta T} = 0$.

Tabelle 3.2: Formulierungen für den Verdampfungs-Korrekturterm f_2 , sowie für das Stoffaustauschpotential H_M für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Modelle nach [87].

Name	f_2	$H_{\Delta M}$
Abramzon-Sirignano	$-\frac{\dot{m}_d}{m_d B'_T} \left(\frac{3 Pr_g \tau_d}{Nu} \right)$	$\ln(1 + B_M)$
Langmuir-Knudsen	$\frac{\beta}{\exp \beta - 1}$	$\ln(1 + B_M)$

Die Nomenklatur ist hierbei wie folgt aufgebaut; Gleichgewichtsmodelle und die zugehörigen Variablen tragen den Akzent »eq«, Nicht-Gleichgewichtsmodelle den Akzent »neq«. Als Index der dispersen Phase wird d angewendet, für die kontinuierliche Gasphase g , v bezeichnet den verdampften Brennstoff und m das Gemisch aus Gasphase und verdampftem Brennstoff. Der Index ∞ bezeichnet einen Zustand fernab des Tropfens innerhalb der Gasphase. Der Beeinflussung der Tropfengeschwindigkeit aufgrund von Verdampfungsphänomenen wird im Rahmen vorliegender Arbeit keine Rechnung getragen. Eine zusammenfassende Beschreibung der für die Modellierung von Spray-Systemen zur Verfügung stehenden Modelle findet sich u. A. auch bei Crowe et al. [20].

Grundlage einer Modellierung von Massen- und Wärmetransfersprozessen ist die Bestimmung des Molbruches des verdampften Brennstoffs an der Tropfenoberfläche X_s . Diese wird bei vielen Ansätzen gemäß der Clausius-Clapeyron-Gleichung berechnet. Anhand der Clausius-Clapeyron-Gleichung lässt sich der Verlauf der Siedepunktkurve eines Stoffes bei konstanter latenter Wärme L_v errechnen. In einem Phasendiagramm gibt der temperaturabhängige Sättigungsdampfdruck p_{sat} hierbei den Wert des Drucks entlang der Phasengrenzlinie zwischen der gasförmigen und der korrespondierenden flüssigen, bzw. festen Phase an. Der Sättigungsdampfdruck eines Stoffes ist also der Druck, bei dem ein Gleichgewichtszustand

zwischen der gasförmigen Phase und der flüssigen bzw. festen Phase vorliegt. Die Clausius-Clapeyron-Gleichung entspricht in ihrer thermodynamisch akkuraten Formulierung mit der verdampfungsbedingten Volumenänderung $\Delta V_{m,v}$ [115, 126]:

$$\frac{\partial p}{\partial T} = \frac{\Delta H_{m,v}}{\Delta V_{m,v} T}, \quad (3.115)$$

wobei die integrierte Form unter Annahme einer konstanten Verdampfungsenthalpie $\Delta H_{m,v}$ für ein ideales Gas über einen infinitesimal kleinen Temperaturbereich T_1 und T_2 mit Gleichung (3.116) dargestellt werden kann:

$$\ln \frac{p_2}{p_1} = \frac{\Delta H_{m,v}}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right). \quad (3.116)$$

R entspricht hierbei der universellen Gaskonstante mit $R = 8314,462 \text{ J/mol K}$. Hieraus folgt für den Molanteil $X_s = [0, \dots, 1]$ des verdampften Brennstoffs an der Oberfläche eines Tropfens der Temperatur T_d :

$$X_s = \frac{p_{\text{sat}}}{p_g} = \frac{p_{\text{atm}}}{p_g} \exp \left(\frac{L_v W_d}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{boil}}} - \frac{1}{T_d} \right) \right), \quad (3.117)$$

$$Y_s = \frac{X_s}{X_s + (1 - X_s) \theta}. \quad (3.118)$$

Hieraus lässt sich desweiteren der Massenbruch des verdampften Brennstoffs Y_s an der Tropfenoberfläche, mit dem Quotienten $\theta = w_g/w_d$ der molekularen Gewichte beider Phasen, bestimmen (3.118). L_v gibt die latente Wärme in der Einheit Joule an, die die bei einem Phasenübergang freiwerdende Energiemenge in Form von Wärme abbildet. Der Begriff der Latenz leitet sich hierbei aus der Annahme konstant bleibender Umgebungstemperatur ab. Das Produkt der latenten Wärme L_v und des Molekulargewichts der dispersen Phase W_d des Brennstoffs entspricht der molaren Verdampfungsenthalpie $\Delta H_{m,v}$. Die molare Verdampfungsenthalpie ist die erforderliche Energie, um ein Mol des betrachteten Brennstoffs isotherm und isobar aus der flüssigen in die gasförmige Phase zu überführen.

Im Rahmen der Berechnung der Referenzwerte T_{ref} und Y_{ref} , bzw. X_{ref} muss sowohl die räumliche, als auch die thermische Variation berücksichtigt werden. Da die vorgestellten Verdampfungsmodelle eine hohe Sensitivität bezüglich dieser Werte aufweisen, ist die Abschätzung von hoher Bedeutung für die Qualität der Simulation. Die Referenzwerte können mit dem Molanteil Y_∞ des verdampften Brennstoff fernab der Tropfenoberfläche wie folgt approximiert werden, wobei für den Parameter A ebenfalls die $1/3$ -Regel Anwendung findet:

$$X_{\text{ref}} = \frac{Y_{d,s} (w_g/w_d)}{1,0 + Y_{d,s} (w_g/w_d)}, \quad (3.119)$$

$$Y_{\text{ref}} = Y_{d,s} + A (Y_\infty - Y_{d,s}). \quad (3.120)$$

Der Koeffizient $A = [0, \dots, 1]$ dient der Definition der Eigenschaften zwischen den Bedingungen an der Tropfenoberfläche und den Bedingungen der umgebenden Gasphase. In der Fachliteratur sind zwar unterschiedliche Vorschläge zu finden, die von Hubbard et al. [61] beschriebene $1/3$ -Regel hat jedoch vielfach Anwendung bei Gleichung (3.120) und (3.121) gefunden:

$$a) \quad T_{\text{ref}} = T_d + A (T_g - T_d), \quad (3.121)$$

$$b) \quad T_{\text{ref}} = 137,0 \cdot \log(T_g) \left(\frac{T_{\text{boil}}}{W_d} \right)^{0,68} - 45,0, \text{ und} \quad (3.122)$$

$$c) \quad T_{\text{ref}} = T_{\text{boil}}. \quad (3.123)$$

Die Temperatur T_{boil} – siehe Gleichung (3.123) – bezeichnet hierbei die druckabhängige Siedetemperatur und W_d das molekulare Gewicht des Brennstoffs. Miller et al. zeigen im Rahmen der von ihnen durchgeführten Simulationen jedoch, dass die $1/3$ -Regel die transiente Aufwärmphase nicht exakt numerisch reproduzieren kann, und schlagen deshalb die Verwendung von Gleichung (3.122) vor. Bei Verwendung der auch als *wet boiling temperature* T_{wb} bezeichneten Referenztemperatur ist eine bessere Übereinstimmung mit experimentellen Daten in einem größeren Temperaturbereich erzielbar, siehe Gleichung (3.123). Die Wahl einer, die Tropfenoberflächentemperatur überschreitenden, Referenztemperatur führt Miller et al. zufolge zu einer Überschätzung der Verdampfungsrate.

Die Tropfen-Relaxationszeit τ_d beschreibt in Gl. (3.113) die Zeit, die ein Tropfen benötigt, um auf eine Änderung der Bewegung der Gasphase zu reagieren:

$$\tau_d = \frac{\rho_d d^2}{18\mu_g}. \quad (3.124)$$

Die Berechnung von μ_g wird in Gl. (3.147) vorgestellt, die Dichte der dispersen Phase ρ_d wird als konstant betrachtet. Insbesondere in turbulenten tropfenbeladenen Strömungen ist τ_d von hervorgehobener Bedeutung nach Crowe et al.. Die Prandtl-Zahl (3.125) der Gasphase gibt das Verhältnis der kinematischen Viskosität ν zur Temperaturleitfähigkeit α der Gasphase an und ist somit ein Maß für die den Wärmeübergang beschreibenden Felder des Impuls- und des Wärmetransports:

$$Pr_g = \frac{\nu_g}{\alpha_g} = \frac{\mu_g c_{p,g}}{\lambda_g}, \quad (3.125)$$

$$Sc_g = \frac{\mu_g}{(\rho_g D)}. \quad (3.126)$$

Die Schmidt-Zahl (3.126) wiederum gibt das Verhältnis von diffusivem Impuls- zu diffusivem Stofftransport an. Aufgrund der Relativgeschwindigkeit zwischen den Tropfen und der Gasphase bilden sich Grenzschichten für den Wärme- und Stoffaustausch in der Nähe der Tropfenoberfläche aus. Eine Umgebung unter dem Einfluss erzwungener Konvektion hat somit einen signifikanten Einfluss auf die Verdampfungsrate, da sowohl der Massen- als auch der Wärmetransfer zwischen der dispersen und kontinuierlichen Phase verstärkt wird. Dieses Phänomen wird u. A. durch Scherspannungen an der Grenzfläche zwischen den Phasen, die eine interne Flüssigkeitszirkulation induzieren, hervorgerufen. Um den erhöhten Übertragungsraten Rechnung zu tragen, werden die dimensionslosen Kennzahlen der Massen- und Wärmeübertragung mit semi-empirischen Korrelationen korrigiert. Die Sherwood-Zahl Sh beschreibt hierbei das Verhältnis der effektiv übergehenden Stoffmenge zu der durch Diffusion transportierten Stoffmenge. Die Nusselt-Zahl Nu dient als Maß der Intensität für die quantitative Veränderung der Wärmeübertragung unter realen Bedingungen durch Konvektion verglichen mit einem ruhenden Fluid unter reiner Wärmeleitung:

$$Sh = 2 + 0,522 Re_d^{1/2} Sc_g^{1/3}, \quad (3.127)$$

$$Nu = 2 + 0,522 Re_d^{1/2} Pr_g^{1/3}. \quad (3.128)$$

Dieser Effekt führt zu einer Aufdickung der Grenzschicht und hat somit Einfluss auf die Transportvorgänge in unmittelbarer Nähe der Tropfenoberfläche. Der die Tropfenoberfläche verlassende Brennstoffdampf wird in der aufgedickten thermischen Grenzschicht auf Umgebungstemperatur erwärmt und behindert somit nach Kolaitis u. Founti die Massen- und Wärmetransfersprozesse. Basierend auf der Dampfbeladung ergibt sich Miller et al. [87] folgend die Spalding-Kennzahl des Massentransfers B_M , sowie die Spalding-Kennzahl des Wärmetransfers B_T :

$$B_M = \frac{Y_s - Y_\infty}{1 - Y_s}, \quad (3.129)$$

$$B_T = (T_g - T_s) \frac{c_{p,v}}{L_v}. \quad (3.130)$$

Die Berechnung der zugrundeliegenden thermodynamischen Koeffizienten $c_{p,v}$ und L_v wird im Abschnitt »Thermodynamische Koeffizienten« vorgestellt.

Abramzon-Sirignano-Modell

Das von Abramzon und Sirignano [4] 1989 vorgestellte Modell basiert auf dem d^2 -Modell, gehört jedoch zur Klasse der Modelle mit infiniten Konduktion. Das Modell basiert auf dem Gleichgewichtsansatz (Gleichung (3.117)) und beinhaltet zusätzliche Aspekte zur Berücksichtigung des Einflusses der Stefan-Strömung auf die Massentransferate. Im Vergleich zu simpleren Modellen kann die Vorhersagefähigkeit sowohl für Einzeltropfen, als auch für polydisperse Spray-Systeme signifikant verbessert werden [87].

Abramzon u. Sirignano schlagen eine iterative Berechnung der Nusselt- und Sherwood-Zahl (Gl. (3.127) und (3.128)) zur Berücksichtigung der sog. Stefan-Strömung vor. Die Stefan-Strömung beschreibt ein Transportphänomen hinsichtlich der Produktion und Dissipation, sowie des Transports einer Spezies von der Phasengrenze ausgehend in ein umgebendes Fluid. Jeder Prozess, der eine Spezies produziert oder dissipiert, kann eine Stefan-Strömung verursachen. Eine Stefan-Strömung unterscheidet sich von der durch das Fick-Gesetz beschriebenen Diffusion, beide Phänomene treten jedoch zumeist parallel, partiell in entgegengesetzte Richtungen, auf. Der gesamte Transport einer Spezies ergibt sich durch Summation der Stefan-Strömung und der diffusiven Beiträge. Die Berücksichtigung der Stefan-Strömung erfolgt anhand modifizierter Nusselt- und Sherwood-Zahlen Nu^* bzw. Sh^* , sowie einer modifizierten Spalding-Kennzahl des Wärmetransfers B'_T . Da zur Berechnung der modifizierten Spalding-Kennzahlen ein iterativer Ansatz erforderlich angewendet wird, ist ein Anstieg der Rechenzeit im Rahmen der Verdampfungsmodellierung zu berücksichtigen. Nach Miller et al. [87] sind jedoch weniger als zehn Schritte pro Iteration und Zeitschritt ausreichend:

$$B'_T = (1 + B_M)^\phi - 1 \quad , \text{ mit } \quad \phi = \frac{c_{p,v}}{c_{p,d}} \frac{Sh^*}{Nu^*} \frac{1}{Le} \quad , \quad (3.131)$$

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu - 2}{F_T} \quad , \text{ mit } \quad F_T = \frac{(1 + B'_T)^{0,7}}{B'_T} \ln(1 + B'_T) \quad , \text{ und} \quad (3.132)$$

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh - 2}{F_M} \quad , \text{ mit } \quad F_M = \frac{(1 + B_M)^{0,7}}{B_M} \ln(1 + B_M) \quad . \quad (3.133)$$

Die Berechnung des Verdampfungs-Korrekturterms f_2 aus Tabelle 3.2 entspricht im Rahmen dieses Modells:

$$f_2 = -\frac{\dot{m}_d}{m_d B'_T} \left(\frac{3 Pr_g \tau_d}{Nu^*} \right) \quad . \quad (3.134)$$

Die Berechnung der Veränderung der Tropfenoberfläche erfolgt mittels der in Tabelle 3.2 beschriebenen Koeffizienten $H_M = (1 + B'_{M(eq)})$:

$$R_S = 4\pi Sh^* \frac{\rho_g}{\rho_d} D_{12} \ln(1 + B_M) \quad . \quad (3.135)$$

Die Veränderung der Tropfentemperatur wird wie folgt bestimmt:

$$\theta = \frac{3}{2\pi d^2} R_S \left(\frac{c_{p,g}}{B'_T} (T_g - T_d) - L_v \right) \frac{1}{c_{p,d}} \quad . \quad (3.136)$$

Eine Anwendung dieses Verdampfungsmodells im Rahmen der DQbSMoM findet sich bei Gumprich [52] und Gumprich et al. [49]. Auf dem Modell von Abramzon und Sirignano basierende, weiterführende

Modellierungsansätze für mehrkomponentige Brennstoffe eines Sprays werden von Sazhin et al. [109] beschrieben.

Langmuir-Knudsen-Modell

Die Beschreibung von Massen- und Wärmetransfermechanismen basiert zumeist auf dem Gleichgewichtsansatz zur Beschreibung des Phasenübergangs anhand der Clausius-Clapeyron-Gleichung. In hinreichend akkurater Näherung ist dieser Ansatz für viele Problemstellungen geeignet, lediglich bei der Beschreibung von Massen- und Wärmetransfermechanismen bei Tropfen mit geringem Durchmesser, ähnlich wie in praxisnahen Spray-Konfigurationen, ist die Vorhersageeigenschaft dieser Modelle eingeschränkt. Bellan et al. [54] haben 1978 zum ersten Mal einen Nicht-Gleichgewichtsansatz im Rahmen des Phasenüberganges an der Tropfenoberfläche vor dem Hintergrund einer Verbrennungsmodellierung formuliert.

Bei Nicht-Gleichgewichtsmodellen werden hierbei zusätzliche Parameter, die von den thermodynamischen Zustandsgrößen, wie z. B. Druck, Temperatur und Viskosität abhängen, berücksichtigt. Die Formulierung basiert auf der Fluktuationstheorie von Keizer [70]. Als Ursache von Nicht-Gleichgewichtseffekten gelten zwei thermodynamische Effekte, zum einen der Lösungseffekt nach dem Gesetz von Raoult, der in Lösungen mit mehreren Spezies auftritt, führt hierbei zu einer Erniedrigung des Dampfdrucks p_v gegenüber dem Sättigungsdampfdruck p_{sat} bzw. zu einer Erhöhung der Siedetemperatur T_{boil} (siehe Stephan et al. [126]) und zum anderen das von Young und Laplace formulierte Gesetz der radiusabhängigen Oberflächenspannung. Der Dampfdruck p_v ist der sich einstellende Druck, wenn ein System aus einer verdampfenden Phase und der zugehörigen flüssigen Phase besteht. Der Dampfdruck nimmt hierbei mit steigender Temperatur zu und ist abhängig von den thermodynamischen Eigenschaften des vorliegenden Brennstoffgemischs. Im temperaturabhängigen Gleichgewichtszustand entspricht der Dampfdruck p_v dem Sättigungsdampfdruck p_{sat} , im Nicht-Gleichgewichtszustand ist p_v kleiner als p_{sat} . Hieraus folgt der bereits beschriebene Gleichgewichtsansatz des Molanteils des verdampften Brennstoffs X_s^{eq} an der Tropfenoberfläche aus dem Quotienten des Sättigungs- und des Gasphasendrucks p_g :

$$X_s^{\text{neq}} = \frac{p_v}{p_g}. \quad (3.137)$$

Es gilt folgende Definition $X_s^{\text{neq}} \leq X_s^{\text{eq}}$. Durch Berücksichtigung eines zusätzlichen Terms kann der Einfluss von Nicht-Gleichgewichtseffekten beschrieben werden:

$$X_s^{\text{neq}} = X_s^{\text{eq}} - \left(\frac{2L_k}{d} \right) \beta. \quad (3.138)$$

L_k bezeichnet hierbei die Knudsen-Schichtdicke und β einen dimensionslosen Verdampfungsparameter. Für den Fall $2L_k/d \rightarrow 0$ gilt $X_s^{\text{neq}} = X_s^{\text{eq}}$. Basierend auf [87] können nachfolgende Aussagen zur Bewertung der Vorteile von Nichtgleichgewichts-Modellen gegenüber Gleichgewichtsmodellen getroffen werden:

Tropfendurchmesser – Nicht-Gleichgewichtseffekte sind bei einem Tropfenanfangedurchmesser kleiner $5\text{ e} - 7\text{ m}$ – dieser Durchmesser liegt z. B. in realen Spray-Systemen vor – aufgrund der höheren Verdampfungsrate von Relevanz. Dushin et al. [28] sprechen hingegen in ihrer Veröffentlichung von einem relevanten Tropfendurchmesser d_0 kleiner $1\text{ e} - 8\text{ m}$.

Gasphasentemperatur – Die im Vergleich mit Gleichgewichtsmodellen erzielbare höhere Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen ist insbesondere von der Temperatur T_g der Gasphase und somit der Verdampfungsrate (siehe Gleichung (3.114)) abhängig. Liegt die Temperatur der Gasphase oberhalb der Siedetemperatur der dispersen Phase, können mit Nicht-Gleichgewichtsmodellen Ergebnisse in besserer Übereinstimmung mit den zugrunde liegenden Experimenten erzielt werden. Ist die Umgebungstemperatur hingegen geringer als die Siedetemperatur, sind die Ergebnisse laut Miller et al. größtenteils identisch.

Reynolds-Zahl – Für einen hinreichend kleinen Tropfendurchmesser kann eine Steigerung der Reynolds-Zahl Re_d das Ausmaß von Nichtgleichgewichts-Effekten signifikant durch Beeinflussung des dimensionslosen Verdampfungsparameters β aufgrund der Tropfen-Relaxationszeit τ_d erhöhen. Dieser Effekt wird verstärkt durch steigende Tropfen- bzw. Relativgeschwindigkeit, sowie einen Brennstoff mit höherer Flüchtigkeit.

Aufgrund dieser Aspekte werden Nicht-Gleichgewichtsmodellen eine höhere Allgemeingültigkeit zugesprochen als den Gleichgewichtsmodellen. Im Kontext vergleichsweise geringer Verdampfungsraten haben Nichtgleichgewichtseffekte Kolaitis u. Founti [74] zufolge keinen Einfluss auf die Verdampfungscharakteristik.

Der dimensionslose Verdampfungsparameter β in Gl. (3.138) wird in Abhängigkeit der Veränderung der Tropfenoberfläche berechnet:

$$\beta = - \left(\frac{3Pr_g \tau_d}{2} \right) \frac{\dot{m}_d}{m_d}. \quad (3.139)$$

L_k beschreibt in obiger Gleichung (3.139) die vom Druck abhängige Knudsen-Schichtdicke, die wie folgt berechnet wird:

$$L_k = \frac{\mu_g \sqrt{2\pi T_d R / W_d}}{\alpha_e Sc_g p_g}, \quad (3.140)$$

wobei α_e den molekularen Akkomodationskoeffizienten beschreibt, W_d steht für das Molekulargewicht der dispersen Phase und Sc_g für die Schmidt-Zahl der Gasphase. Der Akkomodationskoeffizient ist Maß der Unvollkommenheit der Energieübertragung bei Kollisionen flüssiger Oberflächen in einer Gasphase. Der Wert des Akkomodationskoeffizienten hängt insbesondere von der Oberflächenbeschaffenheit und dem Oberflächenzustand, sowie von der Zusammensetzung des Brennstoffs und dem Druck der umgebenden kontinuierlichen Phase ab. Miller et al. [87] schlagen bei Betrachtung eines idealen Gases einen Wert von $\alpha_e \approx 1$ vor, Yang u. Wong [146] hingegen von $\alpha_e = 0,93$, unter Berücksichtigung eines nicht-idealen Gases. Entsprechend Dushin et al. [28] nehmen die Unterschiede zwischen Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsmodellen mit abnehmendem Akkomodationskoeffizienten α_e zu. Detaillierte Informationen sind bei Goodman u. Wachman [43], sowie Rader et al. [100] zu finden. Die Berechnung des Massenbruchs des Dampfmassengehalts an der Tropfenoberfläche $Y_{s(neq)}$ erfolgt gemäß der bereits im Kontext der Gleichgewichtsmodelle vorgestellten Gleichung (3.118), die der Spalding-Kennzahlen des Massentransfers analog zu Gleichung (3.129).

Die Verdampfungsdauer eines Einzeltropfens kann unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen um ein Vielfaches länger sein, als unter Gleichgewichtsbedingungen. Dushin et al. [28] zufolge kann gezeigt werden, dass Nicht-Gleichgewichtsmodelle die finale Phase der Tropfenverdampfung akkurater darstellen, da ein unphysikalischer Anstieg der Verdampfungsrates bei sinkendem Tropfendurchmesser vermieden wird. Anhand einer detaillierten Beschreibung der Verdampfung eines Einzeltropfens in einem aufgeheizten Luftstrom beschreiben die Autoren zwei Szenarien. Kleine Tropfen erfahren ein sukzessives Aufheizen mit anschließender Abkühlung aufgrund des Wärmeverlusts, im Anschluss daran erfolgt ein schnelles Aufheizen bis zum vollständigen Verdampfen. Größere Tropfen hingegen erfahren eine Aufheizung bis zur kritischen Temperatur und verdampfen im Anschluss daran ohne Temperaturschwankungen. Laut Miller et al. stellt f_2 eine analytische Lösung der in der kontinuierlichen Phase und an der Tropfenoberflächen herrschenden Bedingungen auf Basis einer logarithmischen Korrelation der Tropfenmasse im quasi-stationären Zustand dar:

$$f_2 = \frac{\beta}{e^{\beta}-1}. \quad (3.141)$$

Zur Quantifizierung des Einflusses haben Miller et al. diese Formulierung im Kontext von Gleichgewichtsmodellen implementiert, was zwar zu einer deutlichen Verbesserung der Übereinstimmung experimenteller und numerischer Daten für den Brennstoff Dekan in einer Stickstoff-Umgebung führt, empfehlen aber dennoch die Anwendung eines Nichtgleichgewichts-Modelles vor dem Hintergrund der Berechnung eines realen Spray-Systems mit den vorherrschenden, kleinen Tropfendurchmessern, da der Mehraufwand hinsichtlich der Implementierung und des Rechenaufwands als gering einzustufen ist. Die Veränderung der Tropfenoberfläche entspricht:

$$R_S = 4\pi Sh \frac{\rho_g}{\rho_d} D_{12} H_M, \quad (3.142)$$

und die hierauf basierende Veränderung der Tropfentemperatur wird anhand:

$$\theta = \frac{3}{2\pi d^2} R_S \left(\frac{\text{Nu } c_{p,g}}{2(e^\beta - 1)} (T_g - T_d) - L_v \right) \frac{1}{c_{p,d}} \quad (3.143)$$

berechnet. Ein Vergleich zwischen den beiden genannten Verdampfungsmodellen im Rahmen der DQbSMoM ist in [130, 131] zu finden.

Thermodynamische Parameter

Ein wichtiger Parameter bezüglich der Aussagekraft eines Verdampfungsmodelles ist die Effizienz und Zuverlässigkeit der Verfahren zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften der dispersen und der kontinuierlichen Phase, sowie des verdampften Brennstoffs. Die benötigten thermodynamischen Werte werden im Rahmen der DQbSMoM für jeden Zeitschritt neu berechnet. Dies geht zwar mit einem erhöhten numerischen Aufwand einher, ist jedoch hinsichtlich der Qualität der Ergebnisse nach Meinung des Autors vorzuziehen. Die thermische Zustandsgleichung und die kalorische Zustandsgleichung der Enthalpie h kennzeichnen den idealen Gaszustand und sind wie folgt definiert:

$$p = \rho RT \quad , \text{ und } \quad dh = c_p dT. \quad (3.144)$$

R steht hierbei für die universelle Gaskonstante mit einem Wert von $R = 8314,46 \text{ J/kmol K}$. Im Rahmen vorliegender Arbeit wird die Dichte ρ der dispersen und der kontinuierlichen Phase als konstant betrachtet. Die im Folgenden beschriebenen, im Rahmen vorliegender Arbeit angewendeten Gleichungen und Koeffizienten zur Berechnung der temperatur- und druckabhängigen thermodynamischen Parameter sind dem VDI-Wärmeatlas [137] entnommen.

Die Verdampfungsenthalpie $\Delta H_{m,v}$ wird mit der Definition der reduzierten Temperatur $T_r = T/T_{\text{krit}}$ wie folgt bestimmt:

$$\Delta H_{m,v} = A(1 - T_r)^{B+CT_r+DT_r^2+ET_r^3}. \quad (3.145)$$

Die Funktion ist hierbei streng monoton fallend mit steigender Temperatur der Gasphase [137]. Als Kriterium zur Anwendung wird $T < T_{\text{krit}} - 30 \text{ K}$ aufgeführt. Die dynamische Viskosität kann als Maß für die Impulsübertragung quer zur Strömungsrichtung in einem bewegten Fluid betrachtet werden. Für die disperse und die kontinuierliche Phase mit der Annahme eines idealen Gases ergibt sich:

$$\mu_d = e^{A+\frac{B}{T}+CT+DT^2+ET^3}, \quad (3.146)$$

$$\mu_g = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4, \quad (3.147)$$

wobei die Viskosität eines idealen Gases unabhängig von der Dichte ist [137]. Die Viskosität der Gasphase beeinflusst insbesondere die Tropfen-Relaxationszeit τ_d , die einen relevanten Parameter innerhalb der

Modellierung des Wärme- und Massentransfers für z. B. Gl. (3.139) darstellt. Ein Maß der Energiespeicherfähigkeit ist die spezifische Wärmekapazität c_p , definiert als die pro Masseneinheit isobar zuzuführende Wärme, um eine Temperaturänderung zu erzielen. Gleichung (3.148) gilt sowohl für die disperse als auch für die kontinuierliche Phase, wobei hier die Annahme eines idealen Gases zugrunde liegt:

$$c_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^{-2}. \quad (3.148)$$

Die Wärmekapazität der dispersen und der kontinuierlichen Phase wird hierbei lediglich von der Temperatur beeinflusst und weist keine Abhängigkeit vom Druck auf [137]. Die Berechnung der Wärmekapazität c_p für ein binäres Gemisch (3.149) aus verdampftem Brennstoff und umgebender kontinuierlicher Phase folgt:

$$c_{p,v} = Y_{\text{ref}} \phi_d + (1 - Y_{\text{ref}}) \phi_g. \quad (3.149)$$

Die Berechnung der Wärmeleitfähigkeit, einer der bestimmenden Größen der Wärmeübertragung, erfolgt mittels Gleichung (3.150):

$$\lambda_g = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4. \quad (3.150)$$

Obiges Polynom gilt sowohl für die disperse als auch für die kontinuierliche Phase. Ähnlich wie die Viskosität steigt die Wärmeleitfähigkeit von Gasen mit der Temperatur an und ist bis zu einem Umgebungsdruck von 1,0 MPa unabhängig von äußeren Druckeinflüssen. Die Bestimmung der Viskosität μ_v , der Wärmeleitfähigkeit λ_v und des Diffusionskoeffizienten D erfolgt mithilfe der semi-empirischen Wilke-Regel (3.151):

$$\phi = \frac{X_{\text{ref}}}{X_{\text{ref}} + (1 - X_{\text{ref}}) \Omega_{a,b}} \phi_d + \frac{(1 - X_{\text{ref}})}{X_{\text{ref}} \Omega_{b,a} + (1 - X_{\text{ref}})} \phi_g, \text{ mit} \quad (3.151)$$

$$\Omega_{a,b} = \frac{\left(1 + \left(\frac{\phi_a}{\phi_b}\right)^{1/2} \left(\frac{W_b}{W_a}\right)^{1/4}\right)^2}{\left(8 \left(1 + \frac{W_a}{W_b}\right)\right)^{1/2}}. \quad (3.152)$$

Der binäre Diffusionskoeffizient D_{12} zweier Stoffe ist insbesondere im Rahmen von Massentransferprozessen zu berücksichtigen. Eine Abschätzung nach der Fuller-Methode führt auf Gleichung (3.153):

$$D_{12} = \frac{0,00143 T^{-7/4} (W_1^{-1} + W_2^{-1})^{1/2}}{p \sqrt{2} \left((\sum \Delta_{v_1})^{1/3} + (\sum \Delta_{v_2})^{1/3} \right)^2}. \quad (3.153)$$

Δ_v beschreibt hierbei das sogenannte, ebenfalls dem VDI-Wärmeatlas entnommene, Diffusionsvolumen. Obige Gleichung weist eine Abhängigkeit von den Parametern Temperatur und Druck auf, und ist weitgehend unabhängig von der Konzentration.

Modellierung der Koaleszens

Der Aspekt der Koaleszens beschreibt in vorliegender Arbeit das Resultat einer Tropfen-Tropfen-Kollision, bei der zwei oder mehrere Tropfen in einen größeren Tropfen übergehen. In dichten Spray-Regimen ist die Koaleszens insbesondere hinsichtlich der Änderung der Charakteristik des Sprays und der Verteilungsfunktion von Relevanz. Einen Anwendungsfall für die Tropfenkoaleszens stellt das sog. *particle*

trajecotory crossing dar, bei dem sich zwei tropfenbeladenen Strömungen im rechten Winkel kreuzen. Der herausfordernde Aspekt bei dieser Konfiguration liegt in der akkuraten Vorhersage der resultierende Ausbreitungsrichtung und Geschwindigkeit. Die Modellierung der Koaleszens Γ innerhalb der Williams-Spray-Gleichung (3.5) basiert im Rahmen der DQbSMoM [52] auf der kinetischen Gastheorie und einer statistischen Beschreibung der Kollisionsvorgänge. Zu den vereinfachenden Annahmen zählen unter Anderem:

- Sphärizität der Tropfen bleibt erhalten,
- Tropfenbewegung erfolgt unter Vernachlässigung der Reibung,
- Berücksichtigung binärer Kollisionen.

Eine Reduktion der Williams-Spray-Gleichung am transienten Term führt zu folgendem Ausdruck:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \Gamma = Q_{\text{coal}}^+ - Q_{\text{coal}}^- . \quad (3.154)$$

Der die Koaleszens beschreibende Term Γ erfährt eine weitere, separate Aufteilung entsprechend der auftretenden Phänomene in einen Quell- und einen Senkenterm Q_{coal}^+ und Q_{coal}^- . Die Betrachtung der Koaleszens erfolgt hierbei unter Vernachlässigung der Tropfentemperatur, die Verteilungsfunktion $f(v, \mathbf{u})$ wird daraufhin nur als Funktion des Volumensanteils und der Geschwindigkeit formuliert. Eine Anwendung der DQbSMoM auf Gl. (3.154) führt zu folgendem Gleichungssystem:

$$\frac{\partial}{\partial t} (w_{k,n}) = a_{k,n}^{\text{coal}} , \quad (3.155)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n}) = \rho b_{k,n}^{\text{coal}} , \quad (3.156)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho w_{k,n} v_{k,n} u_{j,k,n}) = \rho c_{j,k,n}^{\text{coal}} . \quad (3.157)$$

Dies entspricht einer Reduktion des Systems entsprechend Gleichung (3.23), (3.24) und Gleichung (3.2.2). Mit den Quell- und Senkentermen der Koaleszens auf der rechten Seite ergibt sich ein lineares System, auf das ebenfalls eine entsprechende Momententransformation angewendet wird.

Die Anwendung einer Momententransformation auf die RHS von Gl. (3.154) führt auf die Koeffizienten des Vektors des DQMoM-Systems. Die Transformationsvorschrift ist gegeben durch:

$$\int_{v_{k-1}}^{v_k} \int h_{qlmp}(v, \mathbf{u}) (Q_{\text{coal}}^+(v, \mathbf{u}) - Q_{\text{coal}}^-(v, \mathbf{u})) dv d\mathbf{u} = Q_{k,qlmp}^+ - Q_{k,qlmp}^- , \quad (3.158)$$

wobei $h_{qlmp}(v, \mathbf{u}) = v^q u_1^l u_2^m u_3^p$. Da die Temperatur in diesem Modellierungsansatz nicht betrachtet wird, ist die Wahl von 5N Momente zur Lösung des Systems ausreichend, womit sich für Gleichung. (3.58) $A_{61} = A_{62} = A_{66} = 0$ und $d = B_6 = 0$ ergibt. Der Term $Q_{\text{coal}}^-(v, \mathbf{u})$ in Gleichung (3.158) entspricht:

$$\begin{aligned} Q_{\text{coal}}^-(v, \mathbf{u}) &= \int_{v_{k-1}}^{v_k} \int \int_0^\infty \int h_{qlmp}(v, \mathbf{u}) \nu(|\mathbf{u} - \mathbf{u}^*|, v, v^*) f(v, \mathbf{u}) f(v^*, \mathbf{u}^*) dv^* d\mathbf{u}^* dv d\mathbf{u} , \\ &= \int_{v_{k-1}}^{v_k} \int_0^\infty h_{qlmp}(v, \mathbf{u}(v)) \nu(|\mathbf{u}(v) - \mathbf{u}(v^*)|, v, v^*) f(v) f(v^*) dv^* dv , \end{aligned} \quad (3.159)$$

wobei die Geschwindigkeiten auf die Tropfengröße konditioniert sind. Die Berechnung der Integrale basiert ausschließlich auf dem Volumen. Zur Bestimmung von Q_{coal}^+ wiederum werden drei Schritte benötigt; Zuerst wird eine Aufspaltung des Integrationsgrenzen des inneren Integrals durchgeführt, im Anschluss wird eine Anpassung der Integrationsordner vorgenommen, und als letzten Schritt werden die Variablen geändert:

$$\begin{aligned} Q_{\text{coal}}^+(v, \mathbf{u}) &= \frac{1}{2} \int_0^{v_{k-1}} \int_{v_{k-1}-v^*}^{v_k-v^*} \check{h}_{qlmp}(v^\circ, v^*) \nu(|\mathbf{u}(v^\circ) - \mathbf{u}(v^*)|, v^\circ, v^*) f(v^\circ) f(v^*) dv^* dv, \\ &= \frac{1}{2} \int_{v_{k-1}}^{v_k} \int_0^{v_k-v^*} \check{h}_{qlmp}(v^\circ, v^*) \nu(|\mathbf{u}(v^\circ) - \mathbf{u}(v^*)|, v^\circ, v^*) f(v^\circ) f(v^*) dv^* dv, \end{aligned} \quad (3.160)$$

wobei $\check{h}_{qlmp}(v, \mathbf{u}) = h_{qlmp}(v^\circ + v^*, (v^\circ \mathbf{u}(v^\circ) + v^* \mathbf{u}(v)) / (v^\circ + v^*))$ entspricht.

Numerische Integration

Die Integrale von Gleichung (3.159) und (3.160) werden unter Anwendung der Gaußschen Quadratur wie folgt approximiert:

$$\begin{aligned} Q_{\text{coal}}^- &= \sum_{s=1}^{N_s} \left[\int_{\hat{d}_{k-1}}^{\hat{d}_k} \int_{\hat{s}_{k-1}}^{\hat{s}_k} \hat{h}_{qlmp}(\hat{d}\hat{d}^*) \check{\nu}(\hat{d}\hat{d}^*) \hat{f}(\hat{d}) \hat{f}(\hat{d}^*) d\hat{d}^* d\hat{d} \right] \\ &\approx \sum_{s=1}^{N_s} \sum_{i=1}^{N_p+1} \omega_{ki} \sum_{j=1}^{N_p+1} \omega_{sj} \hat{h}_{qlmp}(d_{ki}^3, 0) \check{\nu}(d_{ki}, d_{sj}) \hat{f}(d_{ki}) \hat{f}(d_{sj}), \end{aligned} \quad (3.161)$$

$$Q_{\text{coal}}^+ = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{k-1} \left[\int_{\hat{d}_{s-1}}^{\hat{d}_s} \int_{(\hat{d}_{s-1}^3 - (\hat{d}^*)^3)^{1/3}}^{(\hat{d}_s^3 - (\hat{d}^*)^3)^{1/3}} \hat{h}_{qlmp}(\hat{d}^\circ, \hat{d}^*) \check{\nu}(\hat{d}^\circ, \hat{d}^*) \hat{f}(\hat{d}^\circ) \hat{f}(\hat{d}^*) d\hat{f}(\hat{d}^\circ) d\hat{f}(\hat{d}^*) \right] \quad (3.162)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{1}{2} \left[\int_{\hat{d}_{k-1}}^{\hat{d}_k} \int_0^{(\hat{d}_k^3 - (\hat{d}^*)^3)^{1/3}} \hat{h}_{qlmp}(\hat{d}^\circ, \hat{d}^*) \check{\nu}(\hat{d}^\circ, \hat{d}^*) \hat{f}(\hat{d}^\circ) \hat{f}(\hat{d}^*) d\hat{f}(\hat{d}^\circ) d\hat{f}(\hat{d}^*) \right] \\ &\approx \sum_{s=1}^{k-1} \sum_{i=1}^{N_p+1} \omega_{si} \sum_{j=1}^{N_p+1} \omega_{kj}^+ \hat{h}_{qlmp}(d_{kj}^+(d_{si}), d_{si}) \check{\nu}(d_{kj}^+(d_{si}), d_{si}) \hat{f}(d_{kj}^+(d_{si})) \hat{f}(d_{si}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_p+1} \omega_{ki} \sum_{j=1}^{N_p} \omega_{kj}^+(d_{ki}) \hat{h}_{qlmp}(d_{kj}^+(d_{ki}), d_{ki}) \check{\nu}(d_{kj}^+(d_{ki}), d_{ki}) \hat{f}(d_{kj}^+(d_{ki})) \hat{f}(d_{ki}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_p+1} \omega_{ki} \omega_{kN_s}^+(d_{ki}) \hat{h}_{qlmp}(d_{kN_s}^+(d_{ki}), d_{ki}) \check{\nu}(d_{kN_s}^+(d_{ki}), d_{ki}) \hat{f}(d_{kN_s}^+(d_{ki})) \hat{f}(d_{ki}) \delta_{kN_s} \quad (3.163) \\ &= \sum_{s=1}^{k-1} \sum_{i=1}^{N_p+1} \omega_{si} \sum_{j=1}^{N_p+1} \omega_{kjsi} \hat{h}_{qlmp}(d_{kjsi}(d_{si}), d_{si}) \check{\nu}(d_{kjsi}(d_{si}), d_{si}) \hat{f}(d_{kjsi}(d_{si})) \hat{f}(d_{si}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_p+1} \omega_{ki} \sum_{j=1}^{N_p} \omega_{kjsi} \hat{h}_{qlmp}(d_{kjsi}, d_{ki}) \check{v}(d_{kjsi}, d_{ki}) \hat{f}(d_{kjsi}) \hat{f}(d_{ki}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_p+1} \omega_{ki} \omega_{kN_s ki}^+ \hat{h}_{qlmp}(d_{kN_s ki}, d_{ki}) \check{v}(d_{kN_s ki}, d_{ki}) \hat{f}(d_{kN_s ki}) \hat{f}(d_{ki}) \delta_{kN_s}.
\end{aligned} \tag{3.164}$$

Die Gewichte der Quadratur ω_{ki} und ω_{kjsi} , sowie die Knoten d_{ki} , bzw. d_{kjsi} sind gegeben durch:

$$\omega_{ki} = \frac{\hat{d}_k - \hat{d}_{k-1}}{2} \check{\omega}_i, \tag{3.165}$$

$$\omega_{kj}^+(d_{si}) = \omega_{kjsi} = \frac{(\hat{d}_k^3 - \hat{d}_{si}^3)^{1/3} - (\hat{d}_{k-1}^3 - \hat{d}_{si}^3)^{1/3}}{2} \check{\omega}_j, \tag{3.166}$$

$$d_{ki} = \frac{\hat{d}_k - \hat{d}_{k-1}}{2} \check{t}_i + \frac{\hat{d}_k - \hat{d}_{k-1}}{2}, \tag{3.167}$$

$$d_{kj}^+(d_{si}) = d_{kjsi} = \frac{(\hat{d}_k^3 - \hat{d}_{si}^3)^{1/3} - (\hat{d}_{k-1}^3 - \hat{d}_{si}^3)^{1/3}}{2} \check{t}_j + \frac{(\hat{d}_k^3 - \hat{d}_{si}^3)^{1/3} - (\hat{d}_{k-1}^3 - \hat{d}_{si}^3)^{1/3}}{2}. \tag{3.168}$$

$\hat{\omega}_i$ und \hat{t}_i geben die Gaußschen Gewichte und Knoten auf dem Intervall $[-1, 1]$ der Quadratur an:

$$\hat{t}_i = \frac{2}{N_p}(i-1) - 1, \quad \hat{\omega}_i = \frac{2}{N_p} \quad \text{für } i \in [2, N_p] \quad \text{und} \quad \hat{\omega}_1 = \hat{\omega}_{N_p+1} = \frac{1}{N_p}. \tag{3.169}$$

Detaillierte Informationen zur numerischen Integration sind z. B. bei Törning u. Spallucci zu finden.

Algorithmus der Koaleszens

Nach dem Berechnen der ersten Iteration, bzw. des ersten Zeitschritts werden die für die Koaleszenzmodellierung erforderlichen Daten gespeichert. Auf die für das gesamte Rechengebiet gespeicherten Daten wird während der Simulation zurückgegriffen, der Datensatz behält seine Gültigkeit für alle betrachteten Zeitschritte. Die Strategie des einmaligen Speicherns dient hierbei der Reduktion des numerischen Aufwands. Der Algorithmus der Koaleszenzmodellierung ist wie folgt innerhalb der DQbSMoM für jedes Kontrollvolumen, in dem für den Volumenanteil der dispersen Phasen $\alpha_d > \alpha_{d,\min}$ gilt, und für jeden betrachteten Zeitschritt Δt umgesetzt:

1. Approximation von d_{\max} und Berechnung der Punkte des Rechengitters der Quadratur der Sektion $k = N_s$;
2. Berechnung des Momentenvektors des Durchmessers \mathbf{M}_d der gesamten NDF von den Gewichten $w_{k,n}$ und den Abszissenwerten des Durchmessers $d_{k,n}$;
3. Anwendung der ME-Methode mit dem Momentenvektor \mathbf{M}_d , sowie einem Ansatz zur Beschreibung der Korrelation aus Tropfengröße und Geschwindigkeit zur Rekonstruktion der NDF und Berechnung der Geschwindigkeiten;
4. Berechnung der Knotenwerte für die numerische Quadratur;
5. Numerische Integration von $Q_{k,qlmp}^-$ und $Q_{k,qlmp}^+$ für alle $k \in (1, \dots, N_s)$ und q, l, m und p , wie in Gl.3.2.2 definiert, unter Anwendung der Gleichungen (3.161) und (3.164);
6. Lösung des DQMoM-Systems (siehe Gl. (3.58)) für $a_{k,n}^{\text{coal}}$, $b_{k,n}^{\text{coal}}$ und $a_{j,k,n}^{\text{coal}}$. Die Koeffizienten der RHS des Systems entsprechen hierbei: $Q_{k,qlmp}^+ - Q_{k,qlmp}^-$;

7. Berechnung der Entwicklung der Gewichte und Abszissen mit Gl. (3.155), Gl. (3.156) und Gl. (3.157).

Die Koaleszenz wird nur in den Kontrollvolumen berechnet, in denen der benutzerdefinierte minimale Volumenanteil der dispersen Phase $\alpha_{d,\min}$, üblicherweise wird $\alpha_{\min} = 2,5e - 4$ gesetzt, überschritten wird. d_{\max} repräsentiert die obere Grenze des Durchmessers innerhalb der Sektion $k = N_s$ und wird mit der, ebenfalls vom Benutzer zu definierenden, Formel $d_{\max} = Ad_{N_s,N}$ mit $A > 1$ bestimmt [52].

4 Grundlagen der Verbrennungsmodellierung

Folgendes Kapitel beinhaltet eine allgemeine Beschreibung der Reaktionskinetik 4.1, sowie des Arrhenius-Ansatzes zur Bestimmung der Geschwindigkeit einer Reaktion. In Abschnitt 4.2 werden die grundlegenden Verbrennungsregime – das nicht-vorgemischte und das vorgemischte Regime –, sowie Aspekte der Verbrennung flüssiger Brennstoffe vorgestellt. Hierauf folgt Verbrennungsmodellierung in der Software *PreciseUNS*, sowie die gewählten Kopplungsstrategien für die DQbSMoM und das FGM-Modell. Die zur Kopplung erforderlichen Annahmen, bzw. Erweiterungen der DQbSMoM werden in Kap. 4.4 behandelt. Die zusätzlich implementierten Ansätze zur Modellierung reaktiver Mehrphasenströmungen beziehen sich hierbei auf eine dynamische Subiteration im Rahmen der Verdampfungsmodellierung, sowie einen angepassten Momentenvektor bei der Beschreibung des Momentenflusses über die Sektionsgrenzen hinweg.

Technische Verbrennungssysteme werden i. A. entsprechend der Einbringung des Brennstoffs in vorgemischte und nicht-vorgemischte Systeme unterteilt. Liegt der Brennstoff in einer festen oder flüssigen Phase vor, finden zuerst die sog. heterogenen Reaktionen, z. B. bei flüssigen Brennstoffen die Verdampfung, statt, bevor die homogenen Verbrennungsreaktionen innerhalb der Gasphase stattfinden können. Von Relevanz sind hierbei unter Anderem folgende Aspekte des Verdampfungs-, bzw. Verbrennungsprozesses; Der Einfluss der Tropfen auf die Charakteristik der Strömung hinsichtlich einer Dämpfung oder Anfachung turbulenter Strukturen, sowie der Einfluss der Tropfenverdampfung auf die Erscheinungsform und Propagation der Flammenfront. Turbulente Strukturen führen u. A. zu Verwinkelungen der Flammenfront, die wiederum mit einem erhöhten Brennstoffumsatz innerhalb der Reaktionszone einhergeht. Bei dem Übergang von Edukten zu Produkten sind Aspekte, wie die Geschwindigkeit und die Reversibilität der chemischen Reaktionen zu beachten.

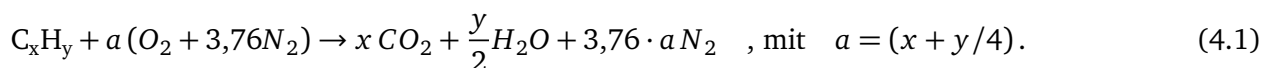
In einem nicht-vorgemischten System vermischen sich Brennstoff und Oxidator aufgrund der strömungsabhängigen Konvektion und der konzentrationsbedingten Diffusion, in einem vorgemischten System hingegen sind Brennstoff und Oxidator vorab auf molekularer Ebene miteinander vermischt – eine zündbare Mischung liegt somit bereits vor. Die Zeitskalen der Reaktionen sind i. A. kleiner als turbulente Zeitskalen und, im Fall eines nicht-vorgemischten Systems, kleiner als die diffusiven Zeitskalen. In einer Vielzahl realistischer Anwendungen ist eine differenzierte Unterscheidung zwischen vorgemischter und nicht-vorgemischter Verbrennung nicht möglich, man spricht in diesem Zusammenhang von partiell-vorgemischten Verbrennungssystemen. Zur Simulation reaktiver Sprays steht eine Vielzahl unterschiedlich komplexer Modellen, mit dem jeweils entsprechenden Modellierungsaufwand, zur Auswahl. Im vorliegenden Fall wird eine Aufspaltung in eine Modellierung der Verbrennungschemie, sowie der Interaktion von Verbrennung und Turbulenz angewendet. Zur Modellierung der Verbrennungschemie stehen Ansätze mit Lösung weniger globaler Gleichungen, Ansätze mit tabellierten Reaktionen und deren Zwischenreaktionen, sowie die Lösung einer Vielzahl detaillierter Gleichungen zur Auswahl [96].

Realistische Spraysysteme umfassen eine Vielzahl von Reaktionen, in denen Moleküle in Unterprodukte zerfallen, beispielsweise in kleinere Moleküle oder Radikale und einzelne Atome, bevor die finalen Produkte entstehen. Da für jede vorkommende Spezies eine Transportgleichung aufgestellt werden muss, ist die Lösung detaillierter chemischer Mechanismen sehr rechenzeitaufwendig, da jede Transportgleichung einen chemischen Quellterm beinhaltet, der wiederum an die anderen Quellterme gebunden ist. Die Steifigkeit des resultierenden Systems reduziert die mögliche Zeitschrittweite und führt folglich zu hohem Rechenaufwand. Aus diesem Grund werden Reaktionsmechanismen oftmals in vorab erstellten Tabellen abgespeichert, auf die während der Simulation mithilfe entsprechend definierter Variablen zugegriffen wird.

Der im Rahmen dieser Arbeit verwendete tabellarische Ansatz basiert auf einer separaten, detaillierten Flammenberechnung im Vorfeld der eigentlichen Simulation. Diese Berechnung basiert auf der Idee, dass eine sich ausbreitende Flamme anhand einer Vielzahl kleiner, eindimensionaler Flammen (*Flamelets*) dargestellt werden kann, die im Anschluss in einer Tabelle zusammengefasst werden – hieraus leitet sich der Name FGM-Modell ab. Von Vorteil ist, dass das FGM Modell weit verbreitet ist und eine Vielzahl von Reaktionsmechanismen zur Tabellengenerierung existieren. Der Tabellenzugriff während der Simulation wird mithilfe sog. Kontrollvariablen realisiert. Im vorliegenden Fall werden der Mischungsbruch Z und die Reaktionsfortschrittsvariable C als Kontrollvariablen verwendet. Der Mischungsbruch (Gl. (4.32)) leitet sich aus dem Verhältnis der Massenströme von Brennstoff und Oxidator ab. Die Reaktionsfortschrittsvariable (Gl. (4.42)), gegeben durch das Verhältnis aus Massenbruch Y und molarer Masse M , beschreibt die Entwicklung der chemischen Reaktion von unverbrannten Reaktanden zu verbrannten Produkten. Zur detaillierten Berechnung der *Flamelets* vorab findet die Software *Chem1D* [120] Anwendung.

4.1 Reaktionskinetik

Zur einleitenden Beschreibung der Reaktionskinetik einer Verbrennung sei folgende allgemeingültig formulierte, stöchiometrische Gleichung (4.1) für die exotherme Oxidationsreaktion aufgeführt. Ein kohlenstoffhaltiger Brennstoff C_xH_y reagiert unter Freisetzung von Wärme mit einem Oxidator, im vorliegenden Fall Luft, bestehend aus Sauerstoff und Stickstoff zu Kohlenstoffdioxid, Wasser und Stickstoff:



Die Reaktionen findet hierbei ausschließlich innerhalb der homogenen Phase statt und entwickelt sich aus einem Zusammenstoß auf molekularer Ebene zwischen den eingehenden Molekülen. Überschreitet die beim Stoß freigesetzte Energie die Aktivierungsenergie, findet die eingangs erwähnte Reaktion der eingehenden Edukte zu den aus der Reaktion hervorgehenden Produkten unter Freisetzung von Wärme statt. Auch wenn eine Vielzahl weiterer Reaktionen stattfindet, so kann doch der Umsatz mithilfe von Globalreaktionen, wie Gleichung (4.1) beschrieben werden. Im Rahmen einer numerischen Simulation wird eine Entscheidung getroffen, welche Zwischenreaktionen und -spezies von besonderem Interesse sind. Die Zwischenspezies können hierbei insbesondere zur Beschreibung der Schadstoffbildung von Interesse sein.

Zur Erläuterung der einer Simulation zugrunde liegenden Annahmen der Reaktionskinetik wird im Folgenden eine Reaktionsgleichung (4.2) betrachtet, bei der die eingehenden Spezies A und B zu den Produkten C und D reagieren. Hierbei ist die Überschreitung der Aktivierungsenergie E_a notwendig, um die sogenannte Kettenstartreaktion auszulösen:



Die stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte sind hierbei mit ν' gekennzeichnet, die der Produkte mit ν'' . Eine detaillierte Darstellung ist oftmals nicht möglich, da hunderte von Elementarreaktionen – mit ihren jeweils korrespondierenden Zeitskalen – ablaufen. Die Reaktion kann prinzipiell in beide Richtungen stattfinden, man unterscheidet zwischen einer Vorwärtsreaktion, gekennzeichnet durch den Index f , und einer Rückwärtsreaktion mit dem Index b . Eine Beschreibung der zeitlichen Änderung anhand der Geschwindigkeit der Vorwärtsreaktion r_f führt auf Gleichung (4.3):

$$r_f = k_f c_A^{\nu'_A} c_B^{\nu'_B}. \quad (4.3)$$

Die Anzahl an Stößen auf molekularer Ebene wird über die Konzentration c_k der Stoßpartner A und B berücksichtigt. Die Umgebungstemperatur T wiederum wird entsprechend, dem mit dem Arrhenius-Ansatz (4.4) berechneten Geschwindigkeitskoeffizienten k_f , beachtet:

$$k_f = A_a T^{\beta_a} \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right). \quad (4.4)$$

Hierbei gibt A_a den stoßzahlabhängigen, präexponentiellen Faktor, β_a den Reaktionsexponenten und E_a die reaktionsspezifischen Aktivierungsenergie (siehe Abb. 4.1) an. Sobald sich die aus der Reaktion hervorgehenden Spezies C und D gebildet haben, es zu einem Stoß zwischen den Molekülen kommt und die Aktivierungsenergie für eine Rückreaktion überschritten ist, kann die Geschwindigkeit der Rückwärtsreaktion r_b mit Gleichung (4.5) bestimmt werden:

$$r_b = k_b c_C^{\nu'_C} c_D^{\nu'_D}. \quad (4.5)$$

Die Geschwindigkeit r der Reaktion ergibt sich aus der Differenz der Vorwärts- und der Rückwärtsreaktion r_f und r_b :

$$r = r_f - r_b. \quad (4.6)$$

Basierend auf der Reaktionsgeschwindigkeit r kann die zeitliche Änderung der Konzentration jeder Spezies mit Gl. (4.7) wie folgt bestimmt werden:

$$-\frac{1}{\nu'_A} \frac{dc_A}{dt} = -\frac{1}{\nu'_B} \frac{dc_B}{dt} = \frac{1}{\nu'_C} \frac{dc_C}{dt} = \frac{1}{\nu'_D} \frac{dc_D}{dt} = r. \quad (4.7)$$

Unter Berücksichtigung des gesamten Reaktionsmechanismus ergibt sich somit für N Spezies und N_r Elementarreaktionen mit den jeweiligen stöchiometrischen Koeffizienten ν :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{k,m} \mathcal{M}_k = \sum_{k=1}^N \nu''_{k,m} \mathcal{M}_k \quad \text{für} \quad (m = 1, 2, \dots, N_r). \quad (4.8)$$

Für jede berücksichtigte Reaktion lässt sich eine Reaktionsgeschwindigkeit r_m ermitteln:

$$r_m = k_{f,m} \prod_{k=1}^N c_k^{\nu'_{k,m}} - k_{b,m} \prod_{k=1}^N c_k^{\nu''_{k,m}} \quad \text{für} \quad (m = 1, 2, \dots, N_r). \quad (4.9)$$

Der Geschwindigkeitskoeffizient der Vorwärts- und Rückwärtsreaktion jeder Elementarreaktion $k_{f/b,m}$ ist gegeben durch:

$$k_{f/b,m} = A_{a_{f/b,m}} T^{\beta_{a_m}} \exp\left(-\frac{E_{a_m}}{R_u T}\right) \quad \text{für} \quad (m = 1, 2, \dots, N_r), \quad (4.10)$$

wobei oftmals die Reaktionsgeschwindigkeit der Rückwärtsreaktion unter Anwendung der Gleichgewichtskonstante k_{eq} entsprechend Gleichung (4.11) bestimmt wird:

$$k_{b,m} = \frac{k_{f,m}}{k_{eq,m}}. \quad (4.11)$$

Der Quellterm $\dot{\omega}_k$ innerhalb einer Speziestransportgleichung (2.14) kann in einem abschließenden Schritt entsprechend Gl. (4.12) abgeschätzt werden:

$$\dot{\omega}_k = M_k \frac{dc_k}{dt}. \quad (4.12)$$

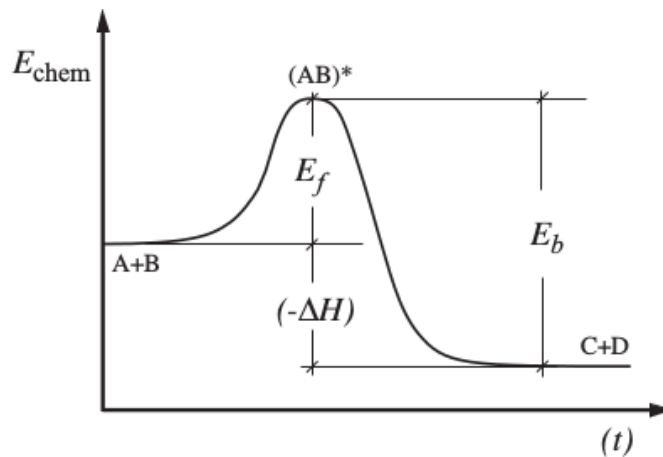


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der chemisch gebundenen Aktivierungsenergie E_f als Funktion der Reaktionszeit t mit Bildung eines Übergangskomplexes für eine exotherme bimolekulare Reaktion $A + B \rightarrow C + D$, siehe [64].

Bei Anwendung eines detaillierten Reaktionsmechanismus können entsprechend obigen Gleichungen für die Reaktionsgeschwindigkeiten und Reaktionskoeffizienten die Spezieskonzentrationen sämtlicher berücksichtigter Komponenten abgebildet werden. Eine Berücksichtigung sämtlicher Komponenten ist jedoch nicht zuletzt rechenzeit- und ressourcenintensiv aufgrund der Vielzahl an Zwischenreaktionen, weshalb häufig reduzierte Reaktionsmechanismen Anwendung finden. Schadstoffe werden bei diesen reduzierten Mechanismen zumeist nicht abgebildet, da sie oftmals Nebenspezies sind, eine starke Abhängigkeit von der Zeit aufweisen und die Bildung auf einen bestimmten Gültigkeitsbereich von Umgebungsdruck und -temperatur beschränkt ist. Technisch relevante Brennstoffe weisen darüber hinausgehend einen ungleich komplexeren molekularen Aufbau auf, was eine Modellierung zusätzlich verkompliziert.

4.2 Verbrennungsregime

Klassische Ansätze zur Beschreibung homogener Verbrennungsregime basieren auf einer Unterscheidung, je nach Einbringung des Brennstoffs und des Oxidators, in nicht-vorgemischte und vorgemischte Systeme. Heterogene Verbrennungsreaktionen setzen ihrerseits ein – im Fall eines flüssigen Brennstoffs – vorheriges Verdampfen voraus und werden im Anschluss an die beiden schematischen Ansätze, Kap. 4.2.1 und 4.2.2, im Unterkapitel Sprayverbrennung 4.2.3 beschrieben.

In Verbrennungssimulationen wird das Mischungsverhältnis von Brennstoff und Luft über den Mischungsbruch Z angegeben. Der Mischungsbruch Z ist in einem Bereich zwischen 0, reiner Oxidator, und 1, dieser Zustand kennzeichnet das Vorliegen reinen Brennstoffs, definiert. Bei einer vollständigen Umsetzung des zur Verfügung stehenden Brennstoffs mit der Luft, wird von einem stöchiometrischen Mischungsverhältnis Z_{st} gesprochen. Für die in Abbildung 4.4b schematisch gezeigte Diffusionsflamme für Wasserstoff liegt der rot eingefärbte, brennbare Bereich des Mischungsbruchs zwischen $Z = 0,03 - 0,59$. Im unteren Bereich liegt eine understöchiometrische, im oberen Bereich eine überstöchiometrische Mischung vor, die durch die durchgezogene senkrechte Linie des stöchiometrischen Mischungsbruchs $Z_{st} = 0,31$ voneinander getrennt sind. Eine understöchiometrische Mischung gibt hierbei einen Überschuss des Oxidators – auch als »magere« Verbrennung bezeichnet – an, im überstöchiometrischen, »fetten« Bereich liegt hingegen ein Überangebot an Brennstoff vor. In nahezu allen technisch relevanten Verbrennungssystemen kommt Luft, beziehungsweise der in der Luft enthaltene Sauerstoff O_2 als Oxidator zur Anwendung, weshalb im weiteren Verlauf von einem Brennstoff-Luft-Gemisch ausgegangen wird. Die beiden idealisierten Verbrennungsregime treten in der Realität oft in einer kombinierten Form auf. So wird beispielsweise bei der RQL-Verbrennung (*Rich burn, quick quench, lean burn*) in Flugtriebwerksbrennkammern eine

Kombination aus nicht-vorgemischter und vorgemischter Verbrennung genutzt, um zum Einen eine stabile, und zum Anderen eine schadstoffreduzierte Verbrennung sicherzustellen. Für die numerische Simulation dieser Verbrennungszustände sind spezielle Konzepte entwickelt worden, auf die im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht weiter eingegangen wird.

Im Gegensatz zur Flammenfront eines turbulenten Strömungsfelds, weist eine laminare Flammenfront eindeutig definierte Längen-, Zeit- und Geschwindigkeitsmaße auf. Diese werden zum Vergleich mit charakteristischen turbulenten Strömungsmaßen genutzt, um somit die Interaktion zwischen der Flammen und der Turbulenz klassifizieren zu können. Als wichtige Kenngrößen der Beschreibung werden hierfür die Damköhler-Zahl Da und die Karlovitz-Zahl Ka eingeführt. Die Damköhler-Zahl Da gibt das Verhältnis der chemischen Zeit τ_{ch} zur strömungsabhängigen Mischungszeit τ_{mix} an:

$$Da = \frac{\tau_{mix}}{\tau_{ch}}. \quad (4.13)$$

Für $Da \gg 1$ nimmt man an, dass die Flammenfront sehr dünn und der chemische Umsatz des Brennstoffs innerhalb der Flammenfront sehr schnell ist. Die Karlovitz-Zahl Ka entspricht dem Verhältnis des Zeitmaßes einer laminaren Flamme τ_{lam} zum Kolmogorov-Zeitmaß τ_η (Kapitel 2.2.6):

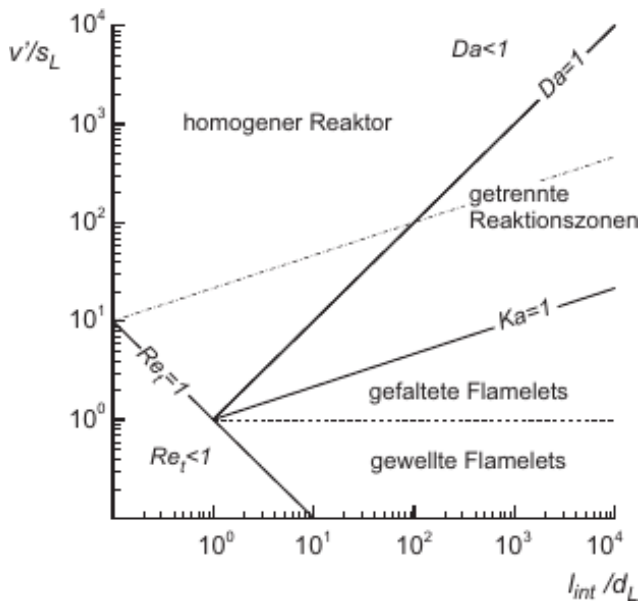
$$Ka = \frac{\tau_{lam}}{\tau_\eta}. \quad (4.14)$$

Die Struktur der Flamme wird für $Ka < 1$ nicht von turbulenten Strukturen beeinflusst, die von Peters angegebenen theoretischen Grenzen für das Auftreten von Löscheffekten liegt bei $Ka > 100$. Für $Ka < 1$ ergibt sich somit zudem, dass die kleinste Wirbelgröße der Strömung größer ist, als die laminare Dicke der Flammenfront d_L und die Wirbel dadurch nicht in die Flammenfront eindringen, und diese zum Verlöschen bringen können. Hieraus folgt, dass die Verbrennung in einer quasi-laminaren Flammenfront stattfindet. Im Gegensatz zur laminaren Flamme erhöht sich jedoch die Gesamtreaktionsrate deutlich, da die durch die Turbulenz hervorgerufene Verwirbelung zu einer Vergrößerung der Flammenoberfläche führt. Laufen die Reaktionen in diesem Bereich im Vergleich zur Durchmischung sehr schnell ab, d. h. wenn $\tau_L \ll \tau_\eta$ gilt, wird die erzielte Umsatzrate des Brennstoffs hauptsächlich durch die turbulente Vermischung bestimmt. In diesem Fall wird von einem rein mischungslimitierten Verbrennungsvorgang, oder von einer Verbrennung im Bereich der »schnellen Chemie«, gesprochen. Bei Vormischflammen bezieht sich die Mischungslimitation auf die Durchmischung von heißen Produkten mit kalten Edukten.

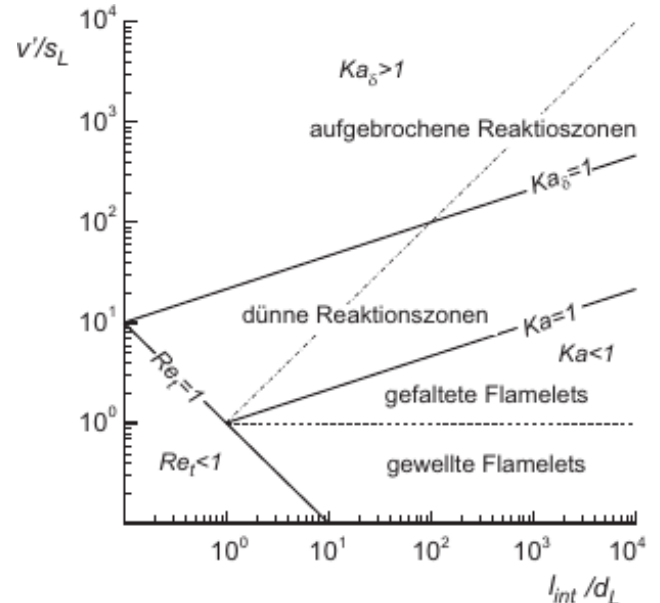
Eine formale Einordnung turbulenter Vormischflammen, basierend auf der Damköhler-Zahl Da , der Karlovitz-Zahl Ka , sowie der turbulenten Reynolds-Zahl Re_τ , kann unter Zuhilfenahme der Regimediagramme nach Borghi (Abb. 4.2a) und Peters (Abb. 4.2b) vorgenommen werden. Letzteres stellt hierbei eine revidierte Form des erstmalig von Borghi eingeführten Regimediagramms dar. Werden die Verläufe für $Da = 1$ und $Ka = 1$ in einem Diagramm mit der Abszisse l_{int}/d_L und der Ordinate v'/s_L aufgetragen, so stellen diese Trennlinien zur Unterscheidung möglicher Brennregime dar. Im Gegensatz zu Borghi, Abb. 4.2a, nimmt Peters eine andere Unterteilung der Verbrennungszustände vor und modifiziert das Diagramm, wie in Abbildung 4.2b, dargestellt. Nach den heutigen Erkenntnissen ist das Diagramm nach Peters die präzisere Wiedergabe der auftretenden Phänomene und dient deshalb als Basis zur Klassifizierung der Verbrennungsvorgänge [99].

Die turbulenten Schwankungen v' , als charakteristisches Geschwindigkeitsmaß einer turbulenten Strömung unter Annahme isotroper Turbulenz, werden, basierend auf der turbulenten kinetischen Energie k (Gleichung (2.35)), wie folgt berechnet:

$$v' = \left(\frac{2}{3} k \right)^{1/2}. \quad (4.15)$$



(a) Diagramm zur Klassifizierung von Verbrennungszuständen einer vorgemischten turbulenten Verbrennung nach Borghi [37].



(b) Diagramm zur Klassifizierung von Verbrennungszuständen einer vorgemischten turbulenten Verbrennung nach Peters [37].

Abbildung 4.2: Diagramm zur Klassifizierung von Verbrennungszuständen einer turbulenten, vorgemischten Verbrennung nach Borghi (a) und Peters (b). Anhand von dimensionslosen Verhältnissen der turbulenten Schwankungen v' zur laminaren Brenngeschwindigkeit s_L bzw. des integralen Längenmaßes l_{int} zur laminaren Flammendicke d_L wird die Interaktion zwischen Strömung und chemischer Reaktion klassifiziert.

Anschaulich kann v' als mittlere Tangentialgeschwindigkeit der großen, energietragenden Wirbel interpretiert werden. Energietragende Wirbel werden mithilfe des sog. integralen turbulenten Längenmaßes l_{int} anhand der turbulenten Reynolds-Zahl Re_t mit Gl. (4.16) charakterisiert:

$$Re_t = \frac{v' l_{int}}{\nu}. \quad (4.16)$$

Auf der Basis des integralen Längenmaßes l_{int} kann mit dem charakteristischen turbulenten Geschwindigkeitsmaß v' ein zugehöriges charakteristisches turbulentes Zeitmaß τ_{int} durch:

$$\tau_{int} = \frac{l_{int}}{v'} \quad (4.17)$$

definiert werden. Die Dicke der laminaren Flammenfront d_L wird aus dem Verhältnis der turbulenten Schwankungen v' und der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L entsprechend Gl. (4.18) bestimmt:

$$\frac{v'}{s_L} = \frac{1}{Da} \frac{l_{int}}{d_L}. \quad (4.18)$$

Obige Formulierung ist wiederum äquivalent ist zu Gleichung (4.19):

$$\frac{v'}{s_L} = Ka^{2/3} \left(\frac{l_{int}}{d_L} \right)^{1/3}. \quad (4.19)$$

τ_L entspricht der Zeit, die eine laminare Flamme mit der Geschwindigkeit s_L benötigt, um eine Strecke zurückzulegen, die ihrer eigenen Dicke d_L entspricht:

$$\tau_L = \frac{d_L}{s_L}. \quad (4.20)$$

Die markierten Bereiche in Abb. (4.2) lassen sich wie folgt beschreiben:

Laminare Flammen – Bei $Re_t < 1$ propagiert die Flammenfront in einer laminaren Strömung, laminare Flammeninstabilitäten bestimmen das Erscheinungsbild der Flamme. Durch die Interaktion von, an der Flammenfront ausgesandten, Druckwellen und den entsprechenden Reflektionen an umgebenden Wänden, bildet sich in realen Verbrennungsprozessen eine nicht planare, wellenförmige Flammenfront aus. Der lokale Versatz der Flamme kann durch hydrodynamische und diffusive Effekte, die zu einer lokal veränderten laminaren Brenngeschwindigkeit führen, verstärkt werden.

Flamelet-Bereich – Der Bereich $Ka < 1$ wird als *Flamelet*-Bereich bezeichnet. Ein Vergleich des chemischen Zeitmaßes mit dem Kolmogorovschen Zeitmaß der Strömung τ_L zeigt, dass die chemische Reaktion schneller abläuft, als die Bewegung der kleinsten Wirbel; es gilt $\tau_L < \tau_\eta$. Für $Ka < 1$ ergibt sich somit zudem, dass die kleinste Wirbelgröße der Strömung größer ist als die laminare Flammenfrontdicke, und Wirbel somit nicht in die Flammenfront eindringen und diese zum lokalen Verlöschen bringen können. Daraus folgt, dass die Verbrennung in einer quasi-laminaren Flammenfront stattfindet. Im Gegensatz zur laminaren Flamme erhöht sich jedoch die Gesamtreaktionsrate deutlich, da die durch die Turbulenz hervorgerufene Verwinkelung zu einer Vergrößerung der Flammenoberfläche führt. Laufen die Reaktionen in diesem Bereich im Vergleich zur Durchmischung sehr schnell ab, d. h. sobald $\tau_L \ll \tau_\eta$ gilt, wird die erzielte Umsatzrate hauptsächlich durch die turbulente Vermischung bestimmt. In diesem Fall wird von einem rein mischungslimitierten Verbrennungsvorgang, oder von einer Verbrennung im Bereich der »schnellen Chemie« gesprochen. Das *Flamelet*-Regime kann hierbei für $Re_t > 1$ in zwei Bereiche weiter untergliedert werden, den gewellten und den gefalteten *Flamelet*-Bereich. Die Untergliederung erfolgt hinsichtlich des Einflusses, den die laminare Flammeneigendynamik, bzw. turbulenten Mischungsvorgänge auf die Ausbreitung der Reaktionsfront besitzen.

- **Gewellte *Flamelets*** – Im turbulenten Bereich $v' < d_L$ können die turbulenten Fluktuationen die Flammenfront lediglich im Bereich der großen Skalen kinematisch deformieren, sodass die Flammenpropagation maßgeblich durch die lokale Ausbreitung laminarer, gestreckter Flammen bestimmt bleibt. In diesem Regime überwiegen die Effekte der laminaren Flammeninstabilitäten.
- **Gefaltete *Flamelets*** – Die turbulenten Fluktuationen $v' > d_L$ verformen die Flammenfront stark und prägen die Flammenausbreitung durch eine Vergrößerung der Flammenfläche. Die Struktur der Flammenfront selbst bleibt quasi-laminar, da die kleinsten Wirbel größer als die Ausdehnung der Flammenfront sind und somit nicht in diese eindringen können. Die Flammenausbreitung ist folglich hauptsächlich durch die turbulente Verwirbelung geprägt, die Flammenkontur ist willkürlich durch die turbulente Strömung verformt und es kommt zu einer Abtrennung einzelner brennender Bereiche, der sog. Taschenbildung. Die deutlich vergrößerte Oberfläche führt darüber hinausgehend zu einer starken Erhöhung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit.

Dünne Reaktionszonen – Die kleinsten Wirbel können in die Vorwärmzone eindringen und die Struktur verändern, da die chemische Reaktion durch den Enthalpie-Entzug aus der Vorwärmzone beeinflusst wird. Die Wirbel können jedoch nicht in die Flammenfront selbst eindringen. Eine entsprechende Formulierung der, auf die räumliche Ausbreitung der Reaktionszone δ , bezogenen Karlowitz-Zahl Ka_δ ist Gleichung (4.21) zu entnehmen. Die Reaktionszone δ weist hierbei das charakteristische Zeitmaß τ_δ auf:

$$Ka_\delta = \frac{\tau_\delta}{\tau_\eta} \quad , \quad \text{mit} \quad \tau_\delta = \frac{\delta}{s_L} . \quad (4.21)$$

Der Bereich der dünnen Reaktionszonen ist durch $Ka > 1$ und $Ka_\delta < 1$ definiert. Der Vergleich der Längenmaße zeigt, dass in diesem Bereich die Kleinstwirbel einerseits kleiner als die Gesamtdicke der laminaren Reaktionszone δ , andererseits jedoch größer als die Dicke der Flammenfront d_L sind.

Dadurch bleibt die Struktur der Reaktionszone weitestgehend unbeeinflusst vom Strömungsfeld, die Vorwärmzone hingegen wird durch turbulente Mischungsvorgänge vergrößert. Die resultierende Flammenausbreitung wird somit sowohl durch die Intensität der turbulenten Durchmischung, als auch durch die effektive Reaktionsoberfläche bestimmt.

Aufgebrochene Reaktionszonen – Mit zunehmender Turbulenz treten immer kleinere turbulente Strukturen auf. Ist die Turbulenzintensität innerhalb der Strömung so ausgeprägt, dass turbulente Strukturen entstehen, die kleiner als die Reaktionszone sind, d. h. $\eta < \delta$ und $Ka_\delta > 1$ gilt, so findet eine Veränderung der Reaktionszone durch turbulente Transportvorgänge statt. Der Vergleich der Zeitmaße $\tau_\eta < \tau_L$ zeigt, dass die konvektiven, turbulenten Wirbelbewegungen potentielle Reaktionspartner in der Reaktionszone vor Abschluss der chemischen Reaktion trennen können. Durch die verstärkte Durchmischung von unverbranntem Gas mit heißem Gas kann die Reaktion lokal zum Abbruch gebracht werden, da die notwendige Zündtemperatur unterschritten wird. Die bereits gebildeten Radikale und Zwischenprodukte der Reaktion werden abtransportiert und können an einem anderen Ort zu einem erneuten Zünden führen. Die Folge dieser Vorgänge ist, dass keine klar definierte Reaktionsfront, und somit auch keine Flammenstruktur, mehr erkennbar ist. Peters bezeichnet diesen Bereich deshalb als den Bereich der aufgebrochenen Reaktionszonen. Da kleinere turbulente Strukturen ein entsprechend kleineres charakteristisches Zeitmaß besitzen als die integralen Wirbel, stellt sich eine Homogenität in großen Bereichen des reaktiven Strömungsfeldes ein. Borghi identifizierte diesen Bereich, für den $Da < 1$ gilt, als eigenes Regime und bezeichnete es als »homogenen Reaktor«. In diesem Bereich ist ein vollständiges Erlöschen der Flamme möglich, wenn der momentane Gemischzustand mit den damit verbundenen chemischen Gleichgewichtszuständen durch Wärmeverlust an der begrenzenden Geometrie entsprechend verändert wird. Das Regime des homogenen Reaktors wird auch als Bereich der »langsamen Chemie« oder als chemisch limitierter Bereich bezeichnet.

Insbesondere im Bereich der dünnen Reaktionszonen ist der Einfluss der Turbulenz auf den Verbrennungsprozess relevant, und wird im Rahmen der sogenannten »Brenngesetze« erfasst. Ziel ist es dabei, einen direkten Zusammenhang zwischen laminaren und turbulenten Flammengeschwindigkeiten, sowie Turbulenzparametern abzuleiten. Im Folgenden soll der Einfluss, den das turbulente Strömungsfeld auf die turbulente Flammengeschwindigkeit besitzt, beschrieben werden. Hierfür wird das in Abbildung 4.3 exemplarisch dargestellte Brenngesetz vorgestellt, bei dem die dimensionslose, turbulente Brenngeschwindigkeit s_t/s_L als Funktion der ebenfalls dimensionslosen Geschwindigkeitsfluktuation v'/s_L aufgetragen ist. Wie der Verlauf zeigt, steigt im Bereich moderater Turbulenz s_t zunächst linear mit den turbulenten Schwankungen v' (Gl. (4.15)) an. Ab einer gewissen Schwankungsgeschwindigkeit, hier repräsentiert durch den Punkt A, geht der lineare Zusammenhang jedoch verloren und die Flammengeschwindigkeit folgt einen sublinearen Verlauf – dieser Effekt ist als »bending-Effekt« bekannt. Punkt A entspricht im Diagramm von Peters 4.2b dem Wechsel der Flamme vom gefalteten *Flamelet*-Bereich in den Bereich der dünnen Reaktionszonen. Bei einem weiteren Anstieg der Turbulenzintensität tritt ab Punkt B eine Verringerung der turbulenten Flammengeschwindigkeit auf. Der Grund hierfür ist der Übergang der Flamme in das Regime der aufgebrochenen Reaktionszonen, bei dem lokale Löscheffekte eine Reduzierung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit zur Folge haben. Ab Punkt C wird die Flamme im Regime des homogenen Reaktors durch die großskalige Turbulenz so stark gestreckt, dass keine klar definierbare Flammenfront mehr erkennbar ist. Das Brenngesetz wird durch das herrschende integrale Längenmaß der zugrundeliegenden Strömung beeinflusst. Erfasst und klassifiziert wird der Einfluss durch die jeweilige turbulente Reynoldszahl – der Verlauf der Kurve kann somit signifikant von dem in Abb. 4.3 gezeigten Verlauf abweichen.

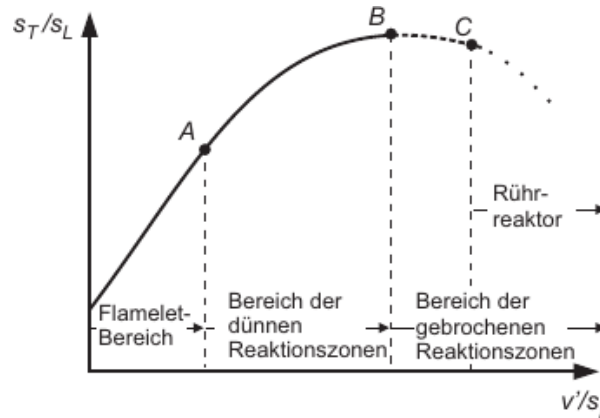


Abbildung 4.3: Exemplarischer Verlauf der, auf die laminare Flammgeschwindigkeit s_L normierten, turbulenten Flammgeschwindigkeit in Abhängigkeit der ebenfalls normierten, turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen [37].

4.2.1 Nicht-vorgemischte Verbrennung

Bei einer nicht-vorgemischten Verbrennung treten Brennstoff und Oxidator getrennt voneinander in das Rechengebiet ein und vermischen sich erst durch diffusive Effekte. Abb. 4.4a zeigt eine schematische Darstellung eines Gegenstrombrenners, bei dem der Brennstoff von links, und der Oxidator von rechts getrennt voneinander in das Rechengebiet einströmen und im Bereich der stöchiometrischen Mischung exotherm miteinander reagieren. Es bildet sich sowohl eine Staupunktströmung, als auch eine lokal begrenzte, heiße Reaktionszone im brennbaren Bereich, in der die Produkte gebildet werden, aus (siehe Abb. 4.4b). Für Modellierung der nicht-vorgemischten Verbrennung stellt der Gegenstrombrenner einen häufig verwendeten Ansatz dar. Eine Reaktion ist nur dann möglich, wenn das Brennstoff-Oxidator-Gemisch innerhalb des Bereichs der Entflammbarkeitsgrenzen, die sogenannte untere und obere Zündgrenze, liegt. Innerhalb dieser Entflammbarkeitsgrenzen findet dann die Reaktion der Edukte zu Produkte statt. Die Zündgrenzen hängen hierbei vornehmlich von der Art des Brennstoffs, vom Umgebungsdruck und der Umgebungstemperatur, sowie den geometrischen Eigenschaften des Brennraums ab. Die Damköhler-Zahl Da (Gleichung (4.13)) ist für Diffusionsflammen sehr hoch, was aus den vergleichsweise kurzen chemischen Zeitskalen im Vergleich zu den Zeitskalen des Mischungsprozesses resultiert. Viele Modellierungsansätze zur Beschreibung der nicht-vorgemischten Verbrennung basieren auf der Annahme hoher Damköhler-Zahlen, man spricht in diesem Zusammenhang häufig von »gemischt entspricht verbrannt«. Hierbei gibt der Stofftransport die geschwindigkeitsbestimmende Größe an, da die Zeitskalen der Reaktion um einige Größenordnungen kleiner sind. Die Mischungsvorgänge zwischen Brennstoff und Oxidator werden zudem durch turbulente Strömungsbewegungen verstärkt.

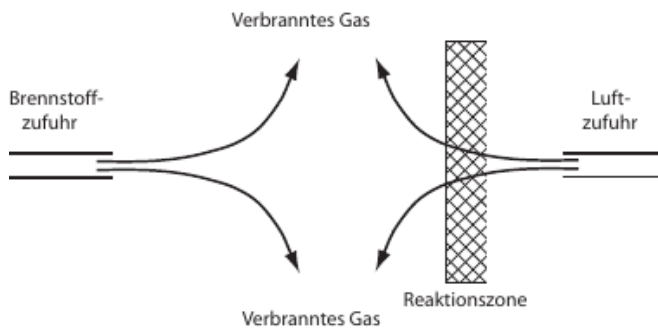
Die Charakterisierung einer Gegenstromkonfiguration, Abbildung 4.4a, erfolgt anhand der Streckungsrate a :

$$a = \frac{u_{\text{Brennstoff}} + u_{\text{Oxidator}}}{\Delta x}, \quad (4.22)$$

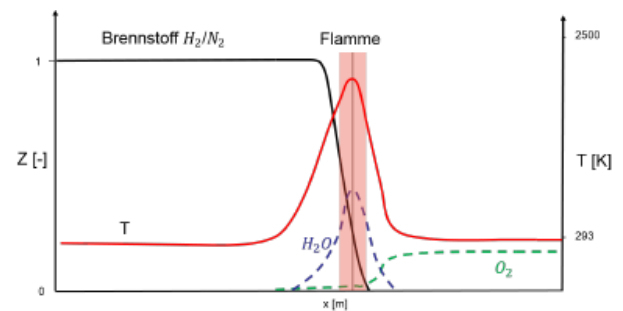
wobei $u_{\text{Brennstoff}}$ und u_{Oxidator} die jeweiligen Ausströmgeschwindigkeiten angeben, und Δx den Abstand der Düsen zueinander. Wird Luft als Oxidator angewendet, kann eine Charakterisierung des Brennstoff-Luft-Gemischs über das dimensionslose Verbrennungsluftverhältnis λ_L vorgenommen werden:

$$\lambda_{\text{Luft}} = \frac{m_{\text{Luft}}}{m_{\text{Luft,st.}}}. \quad (4.23)$$

Hierbei gibt m_{Luft} das Massenverhältnis der tatsächlich vorliegenden Luftmasse, und $m_{\text{Luft,st.}}$ das für eine stöchiometrische Verbrennung erforderliche Massenverhältnis an. Das inverse Verbrennungsluftverhältnis $1/\lambda_L$ entspricht dem Äquivalenzverhältnis Φ .



(a) Schematische Darstellung einer nicht-vorgemischten, laminaren Gegenstromflamme mit der Brennstoffzufuhr (links) und Luftzufuhr (rechts), sowie der sich ausbildenden Reaktionszone.



(b) Auftragung der Spezieskonzentration des Brennstoffs (links) und Oxidators (rechts), sowie der reaktionsbedingten Spezies und der Temperaturverteilung innerhalb einer Gegenstromflamme.

Abbildung 4.4: Schematische Darstellung einer nicht-vorgemischten, laminaren Gegenstromflamme (a), sowie der Konzentrations- und Temperaturverteilung (b) nach [73].

Der Einsatz der nicht-vorgemischten Verbrennung wird durch zukünftige Konzepte der Schadstoffregulierungen zunehmend schwieriger. Das Potenzial der Schadstoffreduzierung innerhalb einer nicht-vorgemischten Verbrennung ohne zusätzliche Sekundärmaßnahmen ist weitestgehend ausgeschöpft. Aus diesem Grund werden zukünftig verstärkt Konzepte verfolgt, die auf einer Vermeidung des stöchiometrischen Verbrennungszustandes basieren. Vor dem Hintergrund einer schadstoffarmen Verbrennung wird häufig mit Vormischflammen gearbeitet.

In Diffusionsflammen wird stets der gesamte brennbare Bereich durchlaufen. Dieser beinhaltet den Punkt der stöchiometrischen Verbrennung, an dem die Gradienten der Spezieskonzentrationen, sowie die Flammentemperatur ihr Maximum erreichen. Aufgrund des in der Verbrennungsluft und/oder im Brennstoff enthaltenen Stickstoffs N_2 findet eine erhöhte Bildung von unerwünschten Stickoxiden NO_x statt, da die thermische NO_x -Bildung – es gibt zwei weitere NO_x -Bildungsmechanismen – mit zunehmender Umgebungstemperatur dominanter wird. Diese erhöhte Stickoxidbildung stellt einen Nachteil der nicht-vorgemischten Verbrennung dar. Durch den definierten brennbaren Bereich hingegen wird eine Flammenbewegung nur in sehr begrenztem Maße ermöglicht und eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit, wie bei einer vorgemischten Verbrennung, existiert bei einer nicht-vorgemischter Verbrennung nicht. Dieser Zustand kennzeichnet einen Vorteil der nicht-vorgemischten Verbrennung, da hierdurch die Stabilität der Verbrennung unterstützt, und z. B. ein ggf. kritisches Rückschlagen der Flamme verhindert wird. Dieses Verhalten wird in Flugtriebwerksbrennkammern zur Stabilisierung der Verbrennung eingesetzt. Die Reduzierung der Schadstoffemissionen, speziell der Stickoxide NO_x , wird in einem begrenzten Rahmen durch eine gestufte Verbrennung erreicht. Das Konzept der gestuften Verbrennung wird im Kontext von Flugzeugtriebwerken als RQL-Prinzip (engl. *Rich burn, quick quench, lean burn*) bezeichnet. Eine RQL-Brennkammer beinhaltet zwei getrennte Verbrennungszonen, in der ersten Zone findet eine überstöchiometrische Verbrennung in einem Bereich mit niedrigen thermischen NO_x -Bildungsraten statt. Durch das anschließende Quenchen wird der Anteil des Oxidators innerhalb der Brennkammer soweit erhöht, dass die Flamme im mageren Bereich brennt. In der sich anschließenden, zweiten Verbrennungszone mit einem unterstöchiometrischen Regime wird die vollständige Verbrennung mit einem Überschuss an Sauerstoff abgeschlossen. Der Übergang zwischen den beiden Verbrennungszonen sollte optimalerweise sprunghaft erfolgen, damit keine Bereiche mit stöchiometrischen Verbrennungsbedingungen entstehen können, da stöchiometrischen Verbrennungsbedingungen durch eine sehr hohe Verbrennungstemperatur mit einer starken thermischen NO_x -Schadstoffbildung gekennzeichnet sind [11].

4.2.2 Vorgemischte Verbrennung

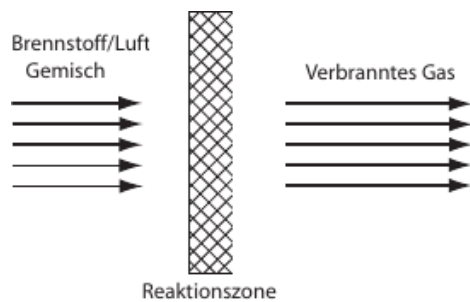
Bei einer vorgemischten Verbrennung werden im Gegensatz zur nicht-vorgemischten Verbrennung Brennstoff und Oxidator bereits in einem auf molekularer Ebene vermischten Zustand in die Reaktionszone eingebracht. Eine Darstellung einer charakteristischen Flamme ist Abb. 4.5a zu entnehmen, die resultierenden Spezieskonzentrationen, sowie der Temperaturverlauf Abb. 4.5b. Der schematisch gezeigte Aufbau repräsentiert hierbei eine Basiskonfiguration zur Berechnung eindimensionaler, vorgemischter *Flamelets* mit der Software *Chem1D* [120]. Die Struktur einer laminaren, stöchiometrischen und frei propagierenden Vormischflamme lässt sich in drei Bereiche gliedern; die im unverbrannten Bereich liegende Vorwärmzone, in Abb. 4.5b mit dem blauen Kasten und der I gekennzeichnet, die mit II gekennzeichnete Reaktionszone, in der die Verbrennung stattfindet, sowie die sich anschließende Oxidationszone, gekennzeichnet durch den in rot eingefassten Bereich III. Die Vorwärmzone ist charakterisiert durch die thermische Diffusion und der damit einhergehenden Vorwärmung des Brennstoffs und des Oxidators und liegt unmittelbar vor der Reaktionszone, Brennstoff und Oxidator liegen hier noch im unverbrannten Zustand vor. Eine weitere Charakteristik stellt die Diffusion von Edukten in die Reaktionszone und von Produkten in die Vorwärmzone dar, die die Ursache der Bewegung der Flammenfront sind. Die anschließende Reaktionszone beschreibt den Übergang vom unverbrannten zum verbrannten Zustand unter Berücksichtigung der Bildung von Reaktionsprodukten. Der große Temperaturgradient steht für das Maximum der Gesamtwärmefreisetzung, wobei starke Gradienten eine gesonderte Betrachtung im Rahmen der Verbrennungsmodellierung erfahren. In der darauf folgenden Oxidationszone sind eine Vielzahl der Elementarreaktionen bereits abgelaufen, lediglich langsamere Reaktionen mit geringer Wärmefreisetzung finden hier noch statt, bis erneut ein Gleichgewichtszustand erreicht ist. Den Abschluss der Reaktionen von Vormischflammen bildet abschließend wieder ein Gleichgewichtszustand, gelb eingefärbter Bereich mit rot gestricheltem Rahmen. Dieser Bereich wird auch als Gleichgewichtszone bezeichnet.

Die räumlichen Abmessungen der Reaktionszone δ sind um ein Vielfaches kleiner als die der Vorwärm- und Oxidationszone. Die räumlichen Abmessungen und Reaktionsabläufe innerhalb der Reaktionszone variieren mit den stöchiometrischen Bedingungen. Durch das auf molekularer Ebene bereits vorgemischte Brennstoff-Oxidator-Gemisch gewinnen Vormischflammen die Eigenschaft, sich mit einer charakterisierenden Geschwindigkeit bewegen zu können. Diese Geschwindigkeit ist im laminaren Kontext als laminare Flammengeschwindigkeit s_l bekannt und gibt eine Propagationsgeschwindigkeit der sich ausbildenden Flammenfront in Richtung des noch unverbrannten Brennstoff-Oxidator-Gemischs an. Die laminare Flammengeschwindigkeit ist hierbei eine experimentell zu bestimmende, von der Mischung, den Brennstoffeigenschaften, sowie dem thermodynamischen Zustand des Gemischs abhängige Größe. Die turbulente Flammengeschwindigkeit s_t wiederum, die als modellabhängige Ersatzgröße bei der Beschreibung von turbulenten Vormischflammen zur Anwendung kommt, hängt zusätzlich vom Strömungszustand und dessen Struktur ab.

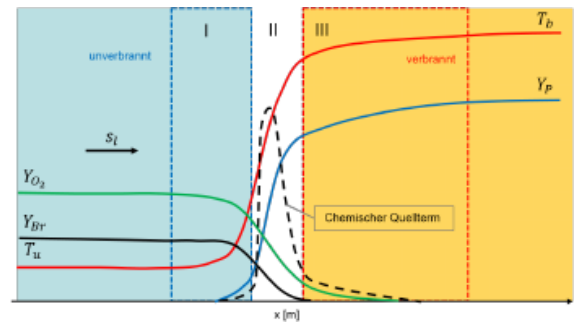
Zusätzlich zur laminaren Flammenausbreitungsgeschwindigkeit kann die laminare Flammendicke d_l bestimmt werden. Für eine Vielzahl an Brennstoffen liegt die laminare Flammendicke im Bereich zwischen 0,1 mm und 1,0 mm, wobei die geringsten Flammendicken im Bereich der stöchiometrischen Mischung zu finden sind. Die Bestimmung der Flammendicke erfolgt unter Berücksichtigung des maximalen Temperaturgradienten und der Temperaturdifferenz zwischen dem verbrannten Zustand T_b und dem unverbrannten Zustand T_u :

$$\delta_l = \frac{T_b - T_u}{\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\max}}. \quad (4.24)$$

In realen Systemen, wie zum Beispiel einer Flugtriebwerksbrennkammer oder der betrachteten experimentellen Konfiguration, ist eine turbulente Strömung vorzufinden, es kommt zur Interaktion zwischen der Flammenfront und den turbulenten Strukturen. Auftretende Verformung der Flammenfront führen zu



(a) Schematische Darstellung einer vorgemischten, laminaren Flachflamme. Brennstoff und Luft werden von links eingebracht, in der Reaktionszone aufgebraucht, auf der rechten Seite liegt das verbrannte Gas vor.



(b) Auftragung der Spezieskonzentration von Brennstoff und Oxidator, sowie der Temperatur bei einer vorgemischten Verbrennung mit Unterteilung in die Vorwärmzone I, die Reaktionzone II und Oxidationszone III.

Abbildung 4.5: Schematische Darstellung einer vorgemischten, laminaren Flachflamme (a), sowie der Konzentrations- und Temperaturverteilung des Brennstoffs und der Luft (b) nach [73].

einer Vergrößerung der Flammenfläche verglichen mit der Flammenfläche einer laminaren Vormischflamme, was wiederum einen erhöhten Brennstoffumsatz zur Folge hat. In der Fachliteratur wird die räumliche Ausbreitung einer turbulenten Flamme mithilfe des sog. *Flamebrush* angegeben. Die turbulente Flammengeschwindigkeit s_t wird mithilfe der Bewegung der gesamten Breite der verwinkelten Flammenfront bestimmt, wobei die turbulente Flammengeschwindigkeit stets größer als die laminare Flammengeschwindigkeit ist. Bei turbulenten Vormischflammen bleibt die vorgestellte dreigeteilte Struktur der Flamme erhalten, starke Änderungen treten jedoch in der Reaktionszone auf. Im Vergleich zu einer laminaren Flammenfront wird die Flammenfront bei turbulenten Strömungsbedingungen durch die vorherrschenden Wirbelstrukturen in Abhängigkeit des Turbulenzgrads verwinkelt – man spricht in diesem Zusammen von einer Interaktion der Turbulenz mit der Flamme (siehe Abb. 4.6).

Turbulente Vormischflammen werden bevorzugt eingesetzt, wenn eine intensive Verbrennung aufgrund von begrenzten Volumenverhältnissen erzielt werden soll, wie z. B. innerhalb von Otto-Motoren. Der Vorteile der vorgemischten Verbrennung ist die nahezu rußfreie und schadstoffarme chemische Umsetzung, da eine definierte Gemischzusammensetzung vorgegeben werden kann, und somit die Stöchiometrie bereits vorab festgelegt ist. Die schadstoffarme Verbrennung ist u. A. ein Grund, warum die Vormischflammen seit längerem in stationär betriebenen Gasturbinen eingesetzt wird. Einen Nachteil, den die Vormischverbrennung mit sich bringt, ist die erhöhte Sicherheitsanforderung, damit das zündfähige

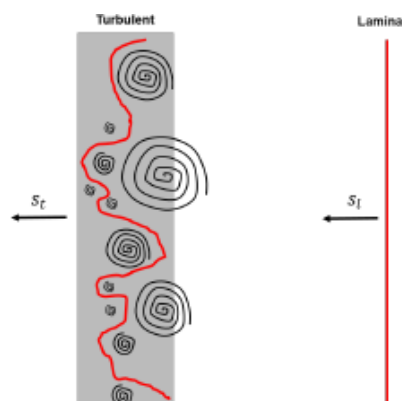


Abbildung 4.6: Vergleich einer durch turbulente Strukturen verwinkelten Flammenfront zu einer laminaren Flammenfront [73].

Brennstoff-Luft-Gemisch nur in einem definierten Bereich kontrolliert verbrennt, da sich die Flammenfront in Abhängigkeit der Strömungsgeschwindigkeit auch stromaufwärts bewegen kann, was wiederum bedeutet, dass ggf. ein problematisches Zurückschlagen der Flamme möglich ist. Dies ist u. A. ein Grund, weshalb die Vormischverbrennung noch nicht instationär betriebener Flugtriebwerke eingesetzt wird.

4.2.3 Sprayverbrennung

Da bei Verbrennungsprozessen in zweiphasigen Systemen Phasenübergänge stattfinden, sind sie wegen der zusätzlichen Komplexität weniger gut verstanden, als Verbrennungsprozesse in rein homogener Phase. Dies ist nicht zuletzt darauf zurückzuführen, dass neben den Prozessen in der kontinuierlichen Phase – chemische Reaktionen und molekularer Transport – auch die Vorgänge in der flüssigen Phase, sowie die Prozesse an den Grenzschichten zwischen den Phasen berücksichtigt werden müssen. Die Spray-Verbrennung ist gekennzeichnet durch komplexe Interaktionen verschiedener Prozesse, wie z. B. von Massen- und Wärmetransfermechanismen, Zündung und Verbrennung, sowie der Wechselwirkung von Tropfen miteinander und mit dem turbulenten Strömungsfeld. Die Tropfencharakteristik des Sprays beeinflusst darüber hinausgehend die Flammendynamik, die Verbrennungseffizienz, sowie die Schadstoffbildung. Da die exakte numerische Modellierung dieser Phänomene für Einzeltropfen rechenzeitaufwendig – und somit in realen Konfigurationen kaum anwendbar ist – ist, werden die Tropfen zu einem Spray zusammengefasst und die Vorgänge entsprechend global mit einer Verteilungsfunktion beschrieben. Nichtsdestotrotz ist der Modellierungsaufwand zweiphasiger Verbrennungssysteme hierbei nach wie vor um ein Vielfaches höher als der für einphasige Systeme.

Während bei einphasigen, gasförmigen Systemen bereits ein homogener Zustand vorliegt, ist bei mehrphasigen, heterogenen Systemen mit einem flüssigen Brennstoff zunächst der Vorgang des Massen- und Wärmetransfers notwendig, wie in Kap. 3.2.4 beschrieben. Die disperse Phase führt aufgrund des variierenden Volumenanteils im Rechengbiet zu einem inhomogenen Gasgemisch mit entsprechend lokal variierenden Äquivalenzverhältnissen. Als Folge hiervon können in zweiphasigen Systemen in Abhängigkeit der Strömung und der Tropfen sowohl Zonen mit vorgemischter, als auch mit nicht-vorgemischter Verbrennung gleichzeitig existieren. Einzelne Brennstofftropfen des Sprays repräsentieren hierbei lokale Quellterme für den Mischungsbruch Z . Darüber hinausgehend existieren überstöchiometrische Bereiche, in denen z. B. die Tropfendichte so groß ist, dass keine Verbrennung stattfinden kann, sowie magere Bereiche, in denen nur sehr wenige Tropfen vorliegen und somit kaum Brennstoff verdampft.

Die vergleichsweise mit dem geringsten Modellierungsaufwand darzustellende Form der Sprayverbrennung liegt vor, wenn sämtliche Tropfen bereits vor dem Erreichen der Reaktionszone verdampft sind. Dies ist, bis auf die Art der verdampfungsbedingten Gemischbildung, vergleichbar mit einer einphasigen Verbrennung. Zunehmend komplizierter wird die Modellierung, sobald eine Interaktion zwischen den Tropfen und der Flammenfront, wie z. B. das Überqueren der Flammenfront durch die Tropfen, berücksichtigt werden muss. Die *Flamelet*-Annahme (siehe Kap. 4.3) gilt auch bei der um einen Tropfen, bzw. um ein Tropfenensemble, brennenden Flammenfront [97]. Zu diesen Faktoren zählen u. A. unterschiedliche Temperaturen und Zusammensetzungen der Gasphase, ein verdampfungsbedingter Enthalpieentzug, sowie verdampfungsbedingt instationäre Prozesse.

Eine grundlegende Analyse der Flammenstruktur in Spraykonfigurationen ist in Chiu et al. für ein quasi-ruhendes Spray zu finden. Die Konfiguration ist ähnlich der eines Gegenstrombrenners, ein Spray mit vorgewärmtem Oxidator als Trägerphase wird von der einen Seite eingebracht, eine Vormischflamme von der anderen Seite. Die Flammenfront propagiert somit in das Spray hinein und es bildet sich eine stehende Flammenfront aus. Aus der Betrachtung des Verlaufs der Verbrennung der flüssigen Brennstofftropfen resultiert das Gruppenverbrennungsmodell, in dem vier unterschiedliche Verbrennungsmoden beschrieben werden.

Die dimensionslose Separation S eines Sprays wird über das Verhältnis des Abstands der Tropfen zueinander mit dem Radius der Tropfen bestimmt:

$$S \propto \frac{\text{Abstand zwischen den Tropfen}}{\text{Tropfenradius}}. \quad (4.25)$$

Einführung der ebenfalls dimensionslosen Gruppenverbrennungszahl (siehe Abb. 4.7a) zur Charakterisierung der Erscheinungsformen der Sprayverbrennung anhand der Tropfenanzahl N innerhalb eines Sprays und der dimensionslosen Separation S :

$$G \propto \frac{N^{2/3}}{S}. \quad (4.26)$$

Die unterschiedlichen Moden sind in Abb. 4.7b dargestellt und werden im Folgenden detailliert erläutert.

Externe Schichtenverbrennung – Für $G \gg 1$ verdampfen nur in der äußeren Schicht die Tropfen, mit dem Oxidator bildet sich eine, das Spray umhüllende, abgehobene Flamme aus. Die Temperatur im Kernbereich ist niedrig aufgrund der hohen Tropfendichte, es finden kaum Verdampfungsvorgänge statt.

Externe Gruppenverbrennung – Für $G > 1$ ist ebenfalls eine umhüllende, externe Flamme erkennbar, im Gegensatz zur externen Schichtenverbrennung sind die Tropfen im Kernbereich des Sprays ebenfalls am Verdampfen.

Interne Gruppenverbrennung – Bei $G < 1$ ist ein Vordringen der umhüllenden, externen Flamme in den Kernbereich des Sprays möglich. Zusätzlich dazu tritt erstmalig eine Einzeltropfenverbrennung in den äußeren Bereichen auf. Die Verbrennung dieser Einzeltropfen entspricht einer nicht-vorgemischten Verbrennung.

Einzeltropfenverbrennung – Ist $G \ll 1$ gibt es keine unterschiedlichen Zonen mehr, sondern es bilden sich separate Flammen um die jeweiligen Tropfen mit nicht-vorgemischtem Charakter aus.

Gounder hat detaillierte Daten anhand von OH-LIF-Aufnahmen¹ ausgewertet und N , S und G für die Konfigurationen AcF1, AcF4 und AcF7 berechnet. Die betrachteten experimentellen Konfigurationen werden detaillierter in Kap. 6 vorgestellt.

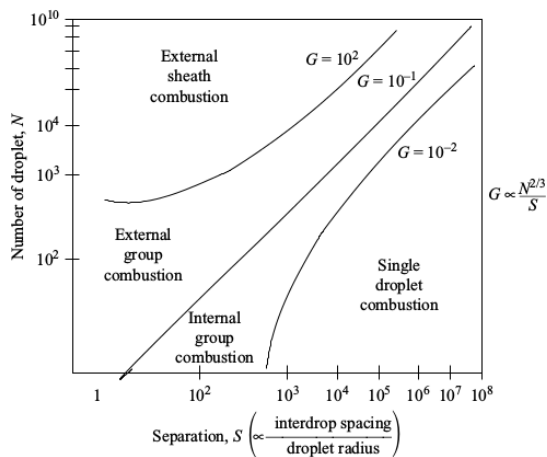
Eine weitere Analyse des Flammenverhaltens in Zweiphasenströmungen findet sich bei Reveillon u. Vervisch. Dort werden vier Erscheinungsformen, die sich wiederum in drei Untergruppen kategorisieren lassen mithilfe einer DNS identifiziert (siehe Abb. 4.8). Die in Abb. 4.8 dargestellten Erscheinungsformen der Sprayverbrennung lassen sich wie folgt untergliedern:

Externe Verbrennung – Die externe Verbrennung ist durch eine kontinuierliche Flammenfront, siehe Abb. a) und b), gekennzeichnet. Die Unterscheidung zwischen beiden erfolgt entsprechend der Erscheinungsform und Position der Flammenfront.

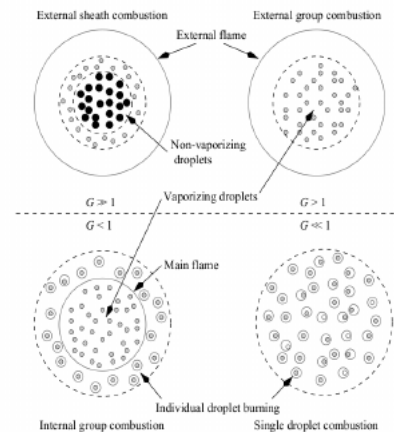
- a) Extern geschlossene Verbrennung – Eine äußere Flamme umhüllt die vollständig verdampften Tropfen, die Flamme weist die Merkmale einer vorgemischten Flamme auf.
- b) Extern offene Verbrennung – Es befinden sich zwei Reaktionszonen mit dem Charakter einer nicht-vorgemischten Flamme an den jeweils äußeren Rändern des Jets.

Gruppenverbrennung – Cluster von Tropfen, die wiederum von vorgemischten und nicht-vorgemischten Flammen umgeben werden, siehe Abb. c).

¹ Laserinduzierte Fluoreszenz anhand des OH-Radikals



(a) Klassifizierung der Sprayverbrennung in Abhängigkeit der doppelt logarithmisch aufgetragenen Tropfenanzahl N und der ebenfalls doppelt aufgetragenen Separation S .



(b) Schematische Darstellung möglicher Erscheinungsformen bei der Sprayverbrennung in Abhängigkeit der Gruppenverbrennungszahl G .

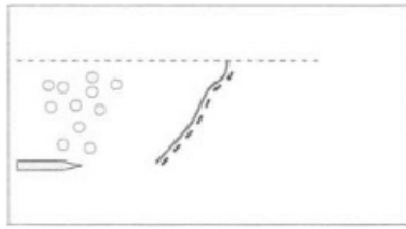
Abbildung 4.7: Klassifizierung der Sprayverbrennung (a), Erscheinungsformen der Sprayverbrennung (b) nach [15].

Hybride Verbrennung – Die hybride Verbrennung stellt eine Kombination beider vorheriger Verbrennungsmoden dar. Es sind vorgemischte Flammen innerhalb der Gruppenverbrennung im Kernbereich des Jets anzutreffen, sowie nicht-vorgemischte Flammen an den Rändern des Jets, die durch Diffusion des Nebenstroms entstehen, siehe Abb. d).

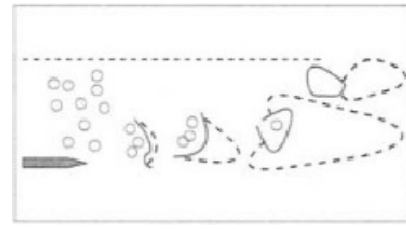
Insbesondere beim Phasenübergang der Tropfen sind Kühleffekte zu beachten, die mit einem Wärmeentzug innerhalb der kontinuierlichen Phase einhergehen. Der Wärmeentzug kann hierbei die chemischen Reaktionen beeinflussen und zum lokalen Verlöschen der Flamme führen. Eine detaillierte Diskussion, sowie numerische Resultate von sowohl reaktiven, als auch nicht-reaktiven Konfigurationen mit Berücksichtigung dieser Verdampfungskühlung sind bei Kadavelil, Sacomano Filho zu finden. Erste Arbeiten zur Identifizierung des vorliegenden Verbrennungsregimes wiederum auf Basis eines sog. Flammensensors wurden bereits mit *PreciseUNS* von Aschmoneit durchgeführt.

4.3 Verbrennungsmodellierung

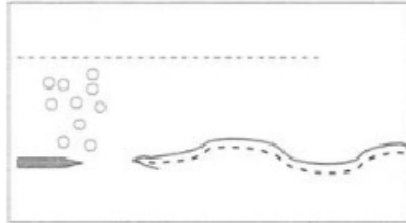
Bei der Berechnung von Verbrennungssystemen wird man, ähnlich wie in der Turbulenzmodellierung, vor die Herausforderung gestellt, dass chemische Prozesse eine hohe Instationarität aufweisen. Die typischen Zeitskalen der Elementarreaktionen in einem chemischen Prozess umfassen, wie in Abbildung 4.9a dargestellt, einen weiten zeitlichen Bereich. Die Dichte und die Viskosität der kontinuierlichen Phase, sowie der herrschende Druck, sind über die Stoffzusammensetzung und die Temperatur direkt an den chemischen Prozess gebunden. Zusätzlich erfolgt durch die chemische Umsetzung, mit der damit einhergehenden Freisetzung von Wärme, eine starke Beeinflussung des Strömungsfeldes. Die Freisetzung von Wärme führt hierbei zu einer Änderung der Stoffzusammensetzung, sowie der vorherrschenden Temperatur. Der chemische Umsatz ist wiederum vom strömungskontrollierten Stofftransport abhängig – somit ergibt sich eine starke Wechselwirkung zwischen dem Strömungsfeld und den chemischen Prozessen. Im Rahmen von numerischen Simulationen von Verbrennungssystemen ist es erforderlich, die chemischen Prozesse, und die hieraus resultierende Wechselwirkung mit dem Strömungsfeld, über eine geeignete Modellierung der Verbrennung abzubilden.



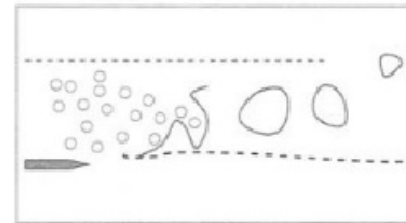
(a) Geschlossene externe Verbrennung.



(b) Gruppenverbrennung.



(c) Offene externe Verbrennung.



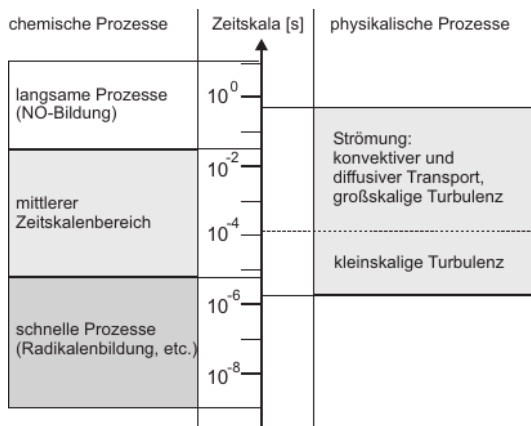
(d) Hybride Verbrennung.

Abbildung 4.8: Schematische Darstellung möglicher Erscheinungsformen der Sprayverbrennung nach [104], ermittelt mit einer DNS.

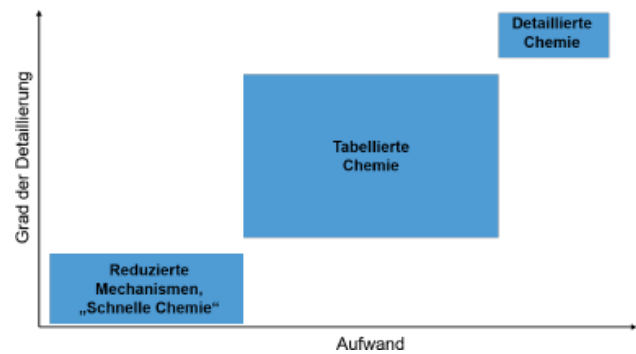
Wie in Kapitel 4.1 angesprochen, hängt der numerische Aufwand und die Güte der numerischen Resultate einer Verbrennungssimulation, neben dem Aspekt der Turbulenzmodellierung, in hohem Maße vom Detaillierungsgrad der Modellierung der chemischen Prozesse ab. Die Modelle zur Abbildung der chemischen Vorgänge in Verbrennungssimulationen lassen sich nach dem Grad der Detaillierung über den benötigten Aufwand grundlegend in drei Gruppen unterteilen, siehe Abb. 4.9b. Nachfolgend ist eine detaillierte Erläuterung der in Abb. 4.9b vorgestellten Modellierungsansätze zu finden.

Detaillierte Chemie – Das akkurateste Abbild chemischer Prozesse wird, ähnlich der DNS im Kontext der Turbulenz, über eine Simulation mit dem Ansatz der »detaillierten Chemie« erzielt. Hierbei wird für jede, an der Reaktion beteiligte, Spezies, sowie die entstehenden Zwischenspezies eine Transportgleichung mit dem jeweiligen Quellterm innerhalb jedes Zeitschritts gelöst [73]. Dadurch entsteht ein gekoppeltes, und dementsprechend steifes Gleichungssystem, in dem jedoch sämtliche Zeitskalen des reaktiven Prozesses abgebildet werden. Da die Zeitskalen reaktiver Prozesse zumeist klein sind, kann die numerische Lösung daher nur mit einer geringen Zeitschrittweiten erreicht werden. Trotz einer sehr hohen Ergebnisgüte ist der Zeit- und Kostenaufwand bei einer Verbrennungssimulation mit detaillierter Chemie vergleichsweise sehr hoch, und dadurch selbst mit heutigen Rechenkapazitäten nur in begrenztem Maße umsetzbar.

Reduzierte Mechanismen – Reduzierte Mechanismen werden z. B. zur Berechnung von nicht-vorgemischten Flammen, basierend auf der Annahme großer Damköhler-Zahlen unter der Annahme sehr schneller Chemie angewendet. Eine wesentliche Annahme ist, dass die Verbrennung nur bei stöchiometrischer Mischung auf einer singulären Flammenfläche stattfinden kann und eine Koexistenz von Brennstoff und Oxidator ausgeschlossen ist. Diese Annahmen entsprechen dem sog. Flammenflächenmodell nach Burke und Schuhmann. Die Autoren beschreiben eine irreversible Reaktionsgleichung auf der Flammenfront, die sich sofort im chemischen Gleichgewicht befindet. Der Mischungsbruch von Brennstoff und Oxidator dient als Indikator der chemischen Umsetzung des Brennstoffs, alle weiteren relevanten Größen der Verbrennungsmodellierung werden hiervon abgeleitet. Das erweiterte Burke-Schuhmann-Modell basiert wiederum auf der Annahme, dass das System über reversible Reaktionen ebenfalls sofort im chemischen Gleichgewicht ist. Eine Koexistenz von Brennstoff und Oxidator ist in diesem Fall in der Nähe des stöchiometrischen Punktes möglich, somit ist die Bildung von Nebenspezies vom Mischungsbruch ableitbar.



(a) Vergleich zwischen chemischen und physikalischen Zeitskalen [73]. Der physikalischen Zeitskala liegen Strömungen bei Verbrennungsprozessen in großskaligen Systemen zugrunde. Die Unterteilung in großskalige und kleinskalige Turbulenz stellt eine Abschätzung dar.



(b) Auftragung des Detaillierungsgrads der Verbrennungsmodellierung über den zu erwartenden numerischen Aufwand [73]. Mit zunehmender Detaillierung steigt der numerische Aufwand an.

Abbildung 4.9: Vergleich der chemischen und physikalischen Zeitskalen (a); Detaillierungsgrad im Vergleich zum numerischen Aufwand (b) [73].

Tabellierte Chemie – Der Ansatz der sog. »Tabellierte Chemie« bildet die dritte Gruppe und liegt sowohl vom Aufwand, als auch vom Grad der Detaillierung bei der Modellierung der chemischen Prozesse zwischen den beiden oben beschriebenen Ansätzen. Der Ansatz der tabellierten Chemie basiert darauf, dass die chemischen Zustände eines Brennstoff-Oxidator-Gemischs in Abhängigkeit des Mischungsverhältnisses von Brennstoff und Oxidator, optional auch mithilfe zusätzlicher Variablen, über thermochemische Zusammenhänge vorab tabelliert werden, und sich somit die Anzahl der zu lösenden Gleichungen im Vergleich zu Ansätzen mit detaillierter Chemie deutlich reduzieren. Die Idee hierzu wurde erstmalig von Williams [144] formuliert und ist als *Flamelet*-Konzept bekannt. Im Rahmen des *Flamelet*-Konzeptes wird eine turbulente, dreidimensionale Flamme durch ein Ensemble von laminaren, eindimensionalen *Flamelets* abgebildet. Die chemischen und thermodynamischen Zustände werden in Abhängigkeit des Mischungsverhältnisses und weiteren Zugriffsparametern in einer externen Tabelle gespeichert, auf die dann während der eigentlichen numerischen Simulation während der Simulation zugegriffen wird. Dieses Modell, auch unter dem Namen *Steady-Flamelet*-Modell bekannt, basiert ebenfalls auf der Annahme schneller Chemie und kann deshalb Effekte endlich schneller Chemie, wie sie in technisch relevanten Verbrennungssystemen auftreten, nicht wiedergeben.

In dieser Arbeit wurden die numerischen Resultate mit einem Ansatz aus der Gruppe der Modellierungsansätze mit tabellierter Chemie erzielt, der eine fortgeschrittenere Methodik verwendet, um die Effekte endlich schneller Chemie zu berücksichtigen. Auf diesen Ansatz, der als FGM-Modell bekannt ist, wird u. A. im folgenden Abschnitt näher eingegangen, da er zur Simulation der im Rahmen dieser Arbeit veröffentlichten numerischen Resultate angewendet wurde.

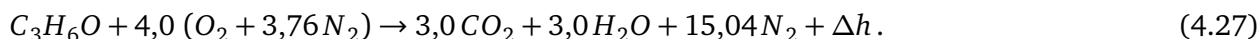
4.3.1 Eddy-Break-Up-Modell

Einer der ersten Ansätze zur Schließung des chemischen Quellterms innerhalb einer numerischen Verbrennungsmodellierung stammt von Spalding. Dieses, aus der RANS-Modellierung abgeleitete, Wirbelzerfallsmodell – auch als *Eddy break-up* (EBU)-Modell bezeichnet – beschreibt den chemischen Quellterm ω als Funktion der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen k und der Dissipation ε , sowie des

Mischungsbruchs Z , bzw. des Massenanteils $Y_{\text{Brennstoff}}$ des Acetons. Da diesem Ansatz keinerlei chemische Reaktionskinetik zugrunde liegt, macht dieses Modell nur belastbare Aussagen bei sehr schnellem chemischen Umsatz. Auftretende Phänomene wie die Bildung von Schadstoffen, das Verlöschen oder Entzünden einer Flamme können nicht abgebildet werden, ebenso wie Aspekte der über- und understöchiometrischen Verbrennung.

Das *Eddy-Break-Up*-Modell gilt u. A. aufgrund seines Alters als eines der bekanntesten Modellen mit, im Vergleich zu den Zeitskalen der Strömung, sehr schneller Chemie. Im Rahmen des Modells gilt die Annahme »gemischt entspricht verbrannt«. Eine Reaktion kommt somit nur dann zustande, wenn turbulente Strukturen vorliegen, d. h. sobald $k/\varepsilon > 0$ ist. Dieser schnelle chemische Umsatz setzt wiederum eine hohe Damköhler-Zahl voraus, siehe Gleichung 4.13. Da der Einfluss der Chemie vernachlässigt wird und lediglich durch die Turbulenz der bestimmende Parameter ist, wird die Reaktionsrate und die Temperatur in vielen Fällen überschätzt.

In *PreciseUNS* ist bereits ein globaler Zwei-Schritt-Mechanismus für den Brennstoff Methan vorhanden. Dieser reduzierte Mechanismus basiert auf der Oxidation von Methan, sowie auf der Oxidation von Kohlenstoffmonoxid zur Beschreibung des chemischen Umsatzes. Zur numerischen Simulation der Verbrennung eines Sprays wurde vor dem Hintergrund der im Fokus dieser Arbeit stehenden Konfiguration (siehe Kap. 6) ein Ein-Schritt-Mechanismus zur Beschreibung des Umsatzes Aceton implementiert:



Relevant ist hierbei insbesondere die reaktionsbedingt freigesetzte Enthalpie Δh für die Berechnung der sich reaktionsbedingt ändernden Gesamtenthalpie, und somit auch der sich reaktionsbedingt ändernden Temperatur der kontinuierlichen Phase. Von der freigesetzten Enthalpie wurde im vorliegenden Fall die für Aceton charakteristische Verdampfungsenthalpie $\Delta H_{\text{m,v}}$ abgezogen. Der Quellterm $\dot{\omega}_Z$ des Mischungsbruchs, bzw. $\dot{\omega}_{Y_\infty}$ des Brennstoffs sind wie folgt implementiert:

$$\dot{\omega}_Z = -C_{\text{EBU}} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \sqrt{\tilde{Z}} \quad , \text{ und } \quad \dot{\omega}_{Y_\infty} = -C_{\text{EBU}} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \sqrt{Y_\infty}. \quad (4.28)$$

Die Wahl der Modellkonstante C_{EBU} hängt hierbei, ebenso wie die Modellkonstanten des k - ε -Modells (siehe Tabelle 2.1), von den experimentellen Rahmenbedingungen ab. Desweiteren sind zusätzliche Modellannahmen notwendig, damit der chemische Quellterm nahe einer Wand in physikalisch haltbaren Grenzen bleibt. Die zu lösenden Transportgleichung des Mischungsbruchs Z ist Gleichung (4.33) zu entnehmen, die Transportgleichung des verdampften Brennstoffs Y_∞ Gleichung (2.66).

Das *Eddy-Break-Up*-Modell wurde im Rahmen der Anpassung des EMSM-Algorithmus auf eindimensionalen Rechengittern mit 300 Kontrollvolumen im Rahmen einer »Machbarkeitsstudie« angewendet, die numerischen Resultate werden im Rahmen dieser Arbeit jedoch aufgrund der mangelnden thematischen Relevanz nicht vorgestellt. Der numerische Aufbau ist hierbei an die experimentelle Konfiguration von Nomura [89] bezüglich der Verbrennung einzelner Tropfen angelehnt (siehe hierzu [52, 131]).

4.3.2 Flamelet-Generated-Manifold-Modell

Das Konzept der Beschreibung einer Flamme anhand eines Ensembles keiner, eindimensionaler Flammen – im englischsprachigen Raum als *Flamelets* bezeichnet – wurde zeitgleich unter dem Namen FGM von den Autoren van Oijen und de Goey [93] und unter dem Namen *Flame Prolongation of Intrinsic low-dimensional manifolds* (FPI) von Gicquel et al. [40] publiziert. Das FGM-Modell basiert auf dem bereits erwähnten *Flamelet*-Konzept und ist für die Phänomene endlich schneller Chemie um eine weitere, den Fortschritt der Reaktion abbildende, Variable erweitert. Bedingt durch die Parametrisierung der chemischen und thermodynamischen Zustandsgrößen eindimensionaler Flammen vorab über zwei, den

Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt beschreibenden Variablen, wird eine Reduktion der benötigten Rechenkapazität bei gleichzeitig akkuraten numerischen Resultate erzielt. Das FGM-Modell ist aufgrund des breiten Anwendungsspektrums als »Stand der Technik« zu bezeichnen [92].

Für die Berechnung eines Verbrennungssystems mit der Gesamtheit an chemischen und thermodynamischen Zuständen wird vor der eigentlichen numerischen Simulation in einem *Preprocessing*-Schritt eine, auf dem Brennstoff basierende, Tabelle der Reaktionsgleichungen mit den entsprechenden chemischen Eigenschaften erzeugt. Die Variablen für den Zugriff auf die Tabellen werden hierbei als sog. Kontrollvariablen bezeichnet, für die jeweils eine Transportgleichung gelöst werden muss. Aufgrund der Verwendung einer vorab erzeugten Tabelle besteht keine Notwendigkeit Transportgleichungen für alle betrachteten Spezies zu lösen. Die Transportgleichungen sind aufgrund der Quellterme gekoppelt und stark voneinander abhängig, was das resultierende Gleichungssysteme steif, und somit zeitaufwendiger und schwieriger zu lösen, macht.

Zur Generierung der Tabelle mit *Chem1D* werden in einem ersten Schritt über den brennbaren Bereich des Mischungsbruchs äquidistant verteilte *Flamelets* mit den entsprechenden Reaktionsfortschrittsvariablen, sowie den zugehörigen chemischen und thermodynamischen Variablen, wie z. B. der Temperatur, den Massenbrüche und der Dichte, auf einem eindimensionalen Rechengitter bestimmt, und anschließend in der Tabelle abgespeichert [133]. Hieraus ergibt sich eine direkte Abhängigkeit sämtlicher Größen ϕ vom Mischungsbruch Z und der Reaktionsfortschrittsvariablen C :

$$\phi = f(Z, C). \quad (4.29)$$

Der Mischungsbruch Z , Abschnitt 4.3.2, ist ein konstanter Parameter und die *Flamelets* basieren auf dem zugrundeliegenden chemischen Reaktionsfortschritt, Abschnitt 4.3.2, der über die zusätzlich eingeführte Reaktionsfortschrittsvariable C definiert wird. Hierdurch können die chemischen und thermodynamischen Größen von Interessen für einen definierten Mischungsbruch räumlich aufgelöst werden, und somit Effekte endlich schneller Chemie in die Berechnung einfließen. Darüber hinausgehend erweist sich als vorteilhaft, dass zur Erstellung der Tabellen detaillierte Reaktionsmechanismen verwendet werden, und somit die Bildung von Nebenspezies und Schadstoffen möglich ist. Die Tabellengenerierung erfolgt bei *Chem1D* durch äquidistante Variation des Mischungsbruchs im Fall vorgemischter Verbrennung, im Fall nicht-vorgemischter Verbrennung durch Variation der Streckungsrate (siehe Gl. (4.22)), die bei einem Gegenstrombrenner das Verhältnis der Geschwindigkeiten zum Abstand der Austrittsdüsen angibt.

Als vereinfachende Annahmen erfolgt die Tabellengenerierung oftmals für eine Lewis-Zahl $Le = 1$:

$$Le = \frac{\lambda}{\rho c_p D} = 1, \quad (4.30)$$

wobei die Lewis-Zahl das Verhältnis der Wärme- zur Stoffdiffusion angibt. Eine weitere vereinfachende Annahme ist, dass ein Diffusionskoeffizient D für alle an der Reaktion beteiligten Spezies verwendet werden kann. Mit *Chem1D* können jedoch ausschließlich *Flamelets* im brennbaren Mischungsbruchbereich erzeugt werden, weshalb im nicht brennbaren Bereich eine lineare Extrapolation der Daten auf Basis einer reinen Mischung vorgenommen wird, um für die numerische Simulation die betrachteten Größen ϕ auch im nicht brennbaren über- und understöchiometrischen Bereich bereitzustellen [71]. Die Temperatur wird über die vorliegende Dichte der Mischung, die molare Masse, den Druck und der spezifischen Gaskonstante mithilfe der idealen Gasgleichung, die in nächster Näherung für reaktive Systeme gilt, bestimmt.

Die Tabelle wurde bisher ohne Berücksichtigung einer verdampfungsbedingten Enthalpieänderung generiert. Eine Arbeit hierzu hinsichtlich der Auswirkungen auf die Resultate einer numerischen Simulation findet sich bei Kadavelil, Sacomano Filho. Den Autoren zufolge können mit dieser angepassten Tabelle lokal tendentiell akkuratere Ergebnisse erzielt werden.

Mischungsbruch

Der Mischungsbruch Z dient als Größe zur Beschreibung des lokalen Brennstoff-Oxidator-Gemischs und gibt den räumlichen Mischungszustand an. Der Mischungszustand stellt im vorliegenden Fall eine Kontrollvariable des FGM-Modells dar und ist wie folgt anhand der Verhältnisse der Elementmassenbrüche $m_{e,k}$ der vorherrschenden Spezies k definiert:

$$z_e = \sum_{k=1}^N m_{e,k} Y_k \quad e = 1, 2, \dots, N_e. \quad (4.31)$$

$m_{e,k}$ entspricht hierbei dem Massenanteil des Elementes e an der Spezies k . Zur Berechnung des Mischungsbruchs Z in mehrphasigen Strömungen erfolgt eine Normierung des Elementmassenbruchs z_e mittels der Elementmassenbrüche im Brennstoff- und Oxidatorstrom:

$$Z = \frac{z_e - z_{e,\text{Oxidator}}}{z_{e,\text{Brennstoff}} - z_{e,\text{Oxidator}}}, \quad (4.32)$$

wobei $z_{e,\text{Oxidator}}$ für den Oxidator, und $z_{e,\text{Brennstoff}}$ für den Brennstoff steht.

Eine Transportgleichung wird unter der vereinfachenden Annahme, dass ein identischer Diffusionskoeffizient $D_k = D$ für alle Spezies gilt, wie folgt formuliert:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Z u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) + \dot{S}_Z. \quad (4.33)$$

Im Gegensatz zu homogenen einphasigen Systemen wird ein, aus den Massentransferprozessen resultierender, Quellterm \dot{S}_Z berücksichtigt. Der Quellterm entspricht hierbei der Menge an Brennstoff, die bedingt durch den Phasenwechsel aus der dispersen in die kontinuierliche Phase übergeht. Für Gleichung (4.33) ergibt sich nach einer Favre-Mittelung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\bar{\mu} + \mu^t}{Sc^t} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right) + \dot{S}_Z \quad (4.34)$$

für ein turbulentes System. Eine Umrechnung des Mischungsbruchs Z in das Äquivalenzverhältnis Φ ist unter Anwendung von:

$$\Phi = \frac{Z}{1-Z} \frac{1-Z_{st.}}{Z_{st.}} \quad (4.35)$$

möglich (vgl. hierzu Gl. (4.23)). Die Berechnung der Varianz des Mischungsbruchs Z''^2 erfolgt innerhalb der Simulation ebenfalls anhand einer Transportgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \widetilde{Z''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \widetilde{Z''^2}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\bar{\mu} + \mu^t}{Sc^t} \right) \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial x_j} \right) - 2\bar{\rho} \tilde{\chi} + 2 \frac{(\bar{\mu} + \mu^t)}{Sc^t} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 + \dot{S}_{\widetilde{Z''^2}}. \quad (4.36)$$

Die Transportgleichung enthält hierbei die sog. skalare Dissipationsrate χ , die eine inverse Mischungszeit darstellt. Die skalare Dissipationsrate wird mithilfe des folgenden Ansatzes berechnet:

$$2\bar{\rho} \tilde{\chi} \approx 2 \frac{\bar{\mu}}{Sc^t} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2. \quad (4.37)$$

Der Quellterm $\dot{S}_{\widetilde{Z}''2}$ wird von den Massentransferprozessen der dispersen Phase maßgeblich bestimmt und entspricht in einer für die DQbSMoM adaptierten Formulierung nach [60]:

$$\dot{S}_{\widetilde{Z}''2} = \frac{(Y_\infty \rho_g \alpha_g)/(1-Y_\infty)}{\delta V} (1 - 2\widetilde{Z}) \frac{\widetilde{Z}''2}{\widetilde{Z}}. \quad (4.38)$$

Obiger Ausdruck ist konsistent zu Gl. (6.7) des EMSM-Algorithmus. Zur Vereinfachung des Tabellenzugriffs wird die Varianz des Mischungsbruchs auf einen Maximalwert skaliert:

$$\widetilde{Z}_{\text{scaled}}''2 = \frac{\widetilde{Z}''2}{\widetilde{Z}(1 - \widetilde{Z})}. \quad (4.39)$$

Gleichung (4.39) repräsentiert die sog. *Unmixedness*-Formulierung.

Reaktionsfortschrittsvariable

Ein Maß zur Beschreibung des Fortschritts einer chemischen Reaktion stellt die Reaktionsfortschrittsvariable γ dar. γ wird zumeist als Summe N_S der gewichteten Massenbrüche einer Spezies k angegeben:

$$\gamma = \sum_{k=1}^{N_S} a_k Y_k. \quad (4.40)$$

a_k entspricht hierbei dem Gewichtungsfaktor des Massenanteils der Spezies Y_k . Grundvoraussetzung für die Wahl der Reaktionsfortschrittsvariablen ist die strikte Monotonität – d. h. eine eindeutige Zuordnung zum thermodynamischen Zustand – über die Flammenfront. Dies bedeutet, dass ein strikt monotoner Verlauf vom Bereich des unverbrannten in den Bereich des verbrannten Zustands bei der Wahl der Reaktionsfortschrittsvariable sichergestellt sein muss. Die Reaktionsfortschrittsvariable ist hierbei frei aus den in der Mischung vorliegenden Spezies wählbar, sie kann auch aus einer Linearkombination mehrerer Spezies gebildet werden. Über den bekannten Reaktionsfortschritt bei lokal festgehaltenem Mischungsbruch Z kann, im Vergleich zu den rein auf dem Mischungsbruch und somit sehr schnellen chemischen Umsetzung basierenden Modellen, eine endlich schnelle chemische und räumlich definierte Umsetzung dargestellt werden. Der Ansatz der endlich schnellen chemischen Umsetzung beinhaltet hierbei die Produktion von Zwischenspezies und der hieraus resultierenden, insbesondere für technische Fragestellungen relevanten, Bildung von Schadstoffen.

Im Rahmen einer turbulenten Simulation ergibt sich folgende zu lösende Transportgleichung (4.41) der Reaktionsfortschrittsvariable γ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\gamma}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\gamma} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\bar{\mu} + \mu^t}{Sc^t} \right) \frac{\partial \tilde{\gamma}}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_\gamma. \quad (4.41)$$

Der Quellterm $\dot{\omega}_\gamma$ wird während der Simulation aus der Tabelle entnommen. Da die Minimal- und Maximalwerte der Reaktionsfortschrittsvariable abhängig vom Mischungsbruch sind, wird ein vereinfachter Tabellenzugriff mithilfe der sog. skalierten Reaktionsfortschrittsvariablen C mithilfe von Gleichung (4.42) angestrebt:

$$C = \frac{\gamma - \gamma_{\min}}{\gamma_{\max} - \gamma_{\min}}. \quad (4.42)$$

Eine Anwendung von Gl. (4.42) auf Gl. (4.41) ergibt Transportgleichung (4.43) der skalierten Reaktionsfortschrittsvariablen:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{C} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\bar{\mu} + \mu^t}{Sc^t} \right) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_C. \quad (4.43)$$

Eine skalierte Reaktionsfortschrittsvariable vereinfacht hierbei die Interpretation des chemischen Zustands, da C somit im Bereich zwischen null und eins definiert ist; $\tilde{C} = 0$ entspricht einem unverbrannten Zustand, $\tilde{C} = 1$ entspricht einem verbrannten Zustand.

Die Abbildung der Chemie-Turbulenz-Interaktion stellt bei vorab integrierten Tabellen für die chemischen Reaktionen eine besondere Herausforderung dar. Eine vergleichsweise einfach umzusetzende Möglichkeit einer Kopplung mit der Turbulenz bietet die Vorannahme einer Wahrscheinlichkeitsfunktion \tilde{P} (*presumed PDF*). Die vorangenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion basiert im vorliegenden Fall auf dem Mischungsbruch Z , der Varianz des Mischungsbruchs Z''^2 , sowie der Reaktionsfortschrittsvariablen C . Mithilfe der *presumed PDF* wird die statistische Verteilung der abhängigen Variablen durch eine vorab angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion abgebildet. Die Varianz des Mischungsbruchs Z''^2 dient zur Beschreibung der Verteilung der Mischung innerhalb eines jeden Kontrollvolumens. Entspricht die Varianz Z''^2 hierbei einem Wert von null, sind Brennstoff und Oxidator auf molekularer Ebene perfekt miteinander vermischt. Erreicht die Varianz einen Maximalwert, entspricht dies einer idealen Trennung der beiden Stoffe.

Die dichte-basierte Filterung der Größen \tilde{Z} , $\widetilde{Z''^2}$ und \tilde{C} führt ohne Anwendung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion \tilde{P} zu einer Vernachlässigung des Einflusses turbulenter Strukturen in den Verbrennungsmodellen. Der Zugriff der ungefilterten Kontrollvariablen Z , Z''^2 und C auf die tabellierten Werte ist nicht ohne Weiteres möglich. Zwischen den abhängigen tabellierten Größen ϕ und den beiden Tabellenparametern Z , Z''^2 und C besteht ein nichtlinearer Zusammenhang, aufgrund dessen von den gefilterten Werten der Tabellenparameter \tilde{Z} , $\widetilde{Z''^2}$ und \tilde{C} nicht auf die abhängigen, tabellierten Größen ϕ geschlossen werden kann, siehe Gleichung (4.44):

$$\phi(\widetilde{Z, Z''^2, C}) \neq \phi(\tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \tilde{C}). \quad (4.44)$$

Um die gefilterten tabellierten Werte $\tilde{\phi}$ zu bestimmen, wird eine gefilterte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}(Z, Z''^2, C)$ angenommen:

$$\tilde{\phi} = \iint \phi(Z, Z''^2, C) \tilde{P}(Z, Z''^2, C) dZ dC. \quad (4.45)$$

Bei Anwendung einer im Bereich zw. null und eins normierten Reaktionsfortschrittsvariable C kann die statistische Abhängigkeit der Größen Z , bzw. Z''^2 , sowie C vernachlässigt werden. Somit lässt sich die Verbundwahrscheinlichkeitsfunktion $\tilde{P}(Z, Z''^2, C)$ als Produkt von zwei einzelnen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen \tilde{P} entsprechend Gleichung (4.46) ausdrücken:

$$\tilde{P}(Z, Z''^2, C) = \tilde{P}(Z, Z''^2) \tilde{P}(C). \quad (4.46)$$

Durch die vereinfachende Definition besteht die Möglichkeit die Integration vor der Simulation innerhalb der Tabelle durchzuführen – hierdurch wird eine deutliche Verkürzung der Rechenzeit erreicht. Als Alternative hierzu bietet sich die aufwändigere Lösung einer Transportgleichung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zur Beschreibung der Turbulenz-Chemie-Interaktion an.

Für die Beschreibung der Turbulenz-Chemie-Interaktion anhand des Mischungsbruchs und der Varianz des Mischungsbruchs wird oftmals auf die β -PDF zurückgegriffen [62, 75, 96]. Die β -PDF kann eine Vielzahl von Formen annehmen – ausgehend vom Zustand reinen Brennstoffs, über den gesamten Mischungsbereich, sowie den Zustand des reinen Oxidators – und ist eine Funktion des gefilterten Werts des Mischungsbruchs \tilde{Z} , sowie der Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2}$, siehe Abb. 4.10. Nach [75] wird für die Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariablen eine δ -PDF vorgeschlagen, diesem Ansatz wird in der vorliegenden Arbeit gefolgt. Mit den genannten Annahmen und den beiden vorangenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen \tilde{P}_β und \tilde{P}_δ erhält man Gleichung (4.47):

$$\tilde{\phi} = \iint \phi(Z, C) \tilde{P}_\beta(\tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) \tilde{P}_\delta(\tilde{C}) dZ dC. \quad (4.47)$$

Die β -Funktion des Mischungsbruchs Z und der Varianz des Mischungsbruchs Z'^2 ist wie folgt definiert:

$$\tilde{P}(Z) = \frac{Z^{a-1} (1-Z)^{b-1}}{\int_0^1 Z^{a-1} (1-Z)^{b-1} dZ}, \text{ mit} \quad (4.48)$$

$$a = \tilde{Z} \left(\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}'^2} - 1 \right) \quad \text{und} \quad b = \frac{1-\tilde{Z}}{\tilde{Z}} \left(\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}'^2} - 1 \right). \quad (4.49)$$

In einem weiterführenden Schritt ist die Anwendung einer momentenbasierten der Verteilungsfunktionen zur Modellierung der Chemie-Turbulenz-Interaktion angedacht. Die Verteilungsfunktionen der Kontrollvariablen werden bei diesem Ansatz, ebenso wie z. B. die Verteilungsfunktion der Tropfendurchmesser, durch Lösen von Transportgleichungen von beschreibenden Momenten rekonstruiert. Eine momentenbasierte Verteilungsfunktion stellt hierbei einen Kompromiss zum detaillierten, jedoch rechenzeitintensiven Ansatz der transportierten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen – bei diesem Ansatz werden Transportgleichungen der Kontrollvariablen gelöst – dar.

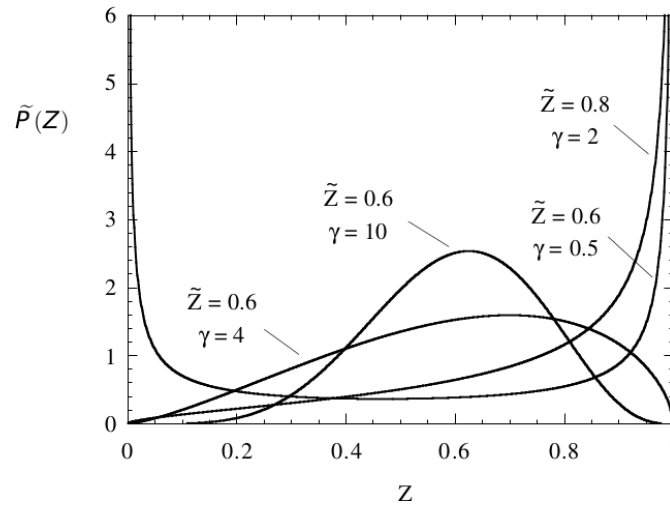


Abbildung 4.10: Auswahl möglicher Erscheinungsformen der β -Funktion in Abhängigkeit des Mischungsbruch \tilde{Z} und der unskalierten Reaktionsfortschrittsvariable γ [97].

4.4 Neuer Ansatz zur Modellierung reaktiver Sprays

Im Folgenden werden die zwei verfolgten, neuen Strategien zur Kopplung der DQbSMoM und des FGM-Modells zur Verbesserung der Aussagekraft des numerischen Gesamtmodells vorgestellt:

- Anwendung einer dynamischen Subiteration mit CFL-ähnlicher Formulierung, basierend auf dem Zeitschritt Δt , dem Massentransferkoeffizienten R_s , sowie der Veränderung der Oberfläche ΔS .
- Implementierung eines angepassten Momentenvektors \mathbf{M}_k im Rahmen des EMSM-Algorithmus zur Beschreibung des Momentenflusses Ψ über die Sektionsgrenzen k .

Die Notwendigkeit für die Verwendung dieser Strategien ist in Abb. 4.11 anhand des dargestellten Vergleichs zwischen dem bisherigen Ansatz, des für reaktive Konfigurationen adaptierten Ansatzes, sowie den zugrundeliegenden experimentellen Resultaten der reaktiven Konfiguration AcF2 des sog. Sydney-Brenners ersichtlich. Die rote Kurve zeigt hierbei den bisherigen Ansatz, die blaue Kurve den neuen Ansatz mit dynamischer Subiteration und revidiertem Momentenvektor. Die experimentellen Resultate sind anhand der schwarzen Punkte dargestellt. Beispielhaft wurde der Sauterdurchmesser D_{32} (siehe Tab. 3.1) der Konfiguration AcF2 an drei verschiedenen Messpositionen, $x/D = 10$, $x/D = 20$ und $x/D = 30$,

aufgetragen. Die zugrundeliegende Dissertation wurde von Gounder verfasst, und wird in Kap. 6 detailliert vorgestellt. Mit dem neuen Ansatz werden insbesondere in den oberen Messebenen bei $x/D = 20$, $x/D = 25$ und $x/D = 30$ deutlich akkuratere Resultate erzielt. Die Abweichungen im äußeren Bereich resultieren aus der momentenbasierten Formulierung der mittleren Tropfendurchmesser und lassen sich dergestalt interpretieren, dass die Anzahl an kleinen Tropfen tendentiell unterschätzt, die Anzahl der großen Tropfen jedoch überschätzt wird. Eine detaillierte Diskussion der numerischen Resultate ist Kap. (6.4) zu entnehmen.

Das FGM-Modell ist zur Kopplung mit der DQbSMoM in den *operator-splitting*-Ansatz, Abschnitt 5.3.3, Gl. (5.36) und Gl. (5.37), eingebunden. Die Interaktion zwischen der reaktiven, kontinuierlichen und der dispersen Phase ist durch eine Abnahme der Tropfendurchmesser $d_{k,n}$, der dispersen Volumenanteile $v_{k,n}$, sowie einer Veränderung der Tropfentemperatur $T_{k,n}$ gegeben. Um die numerische Stabilität des Verfahrens sicherzustellen, sind Minimalwerte für die Durchmesser und die Volumenanteile der dispersen Phase in Konsistenz mit den derzeit experimentell ermittelbaren Größenordnungen festgelegt. Die Tropfentemperatur folgt in diesem Fall der Temperatur der kontinuierlichen Phase, und wird der FGM-Tabelle entnommen.

In einem ersten Schritt wird eine Ein-Weg-Kopplung der Temperatur der kontinuierlichen und der dispersen Phase realisiert, d. h. dass die Temperatur der kontinuierlichen Phase nicht von verdampfungsbedingten Kühlungseffekten der dispersen Phase beeinflusst wird. Den Veränderungen kann jedoch über entsprechende, die Abnahme der Enthalpie berücksichtigende Reaktionsmechanismen bei der Tabellengenerierung, oder über einen zusätzlichen Quellterm innerhalb der Transportgleichung der Enthalpie Rechnung getragen werden. Die Verifizierung und Validierung erfolgt anhand von drei experimentellen Konfigurationen – AcF1, AcF3, sowie der eingangs erwähnten Konfiguration AcF2 – des Sydney-Brenners, siehe Kap. 6.1. Es handelt sich hierbei um ein vorverdampftes, und somit partiell-vorgemischtes, Aceton-Spray in einem Jet, umgeben von einem bereits brennenden Pilotbrenner. Der Jet und der Pilotbrenner sind von einem *Co-flow* bei Raumtemperatur umgeben. Insgesamt haben die Autoren acht unterschiedliche unterschiedliche Konfigurationen vermessen, sie unterscheiden sich jeweils in der eingebrachten Brennstoff- oder Luftmasse, sowie in der Brennstoffwahl. Die Konfigurationen weisen hierbei sowohl vorgemischten, als auch nicht-vorgemischten Charakter auf und sind turbulent.

4.4.1 Dynamische Subiteration

Die »konventionelle« Courant-Friedrich-Lewis (CFL)-Zahl resultiert aus Stabilitätsanforderungen an eine numerische Simulation und gibt das Verhältnis von der Strömungsgeschwindigkeit u und Zeitschrittweite Δt zur Rechengitterweite Δx an. Diese Kennzahl gibt somit an, um wie viele Kontrollvolumen sich eine

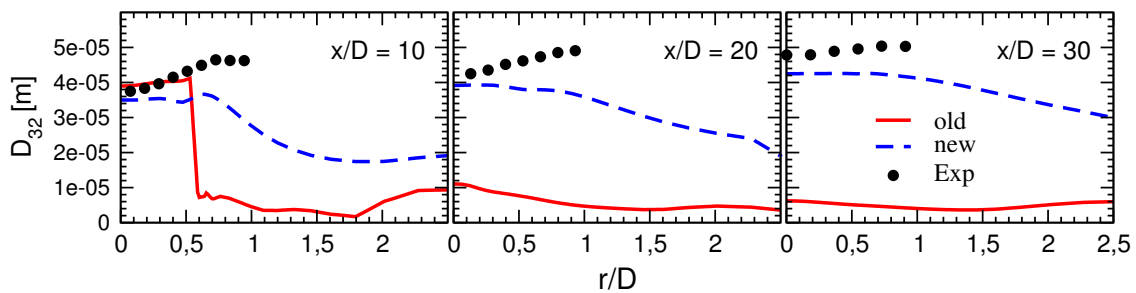


Abbildung 4.11: Darstellung des Sauterdurchmessers D_{32} an den Messpositionen $x/D = 10$, $x/D = 20$ und $x/D = 30$ der Konfiguration AcF2. Die rote Kurve zeigt den bisherigen Ansatz, die blaue Kurve den neuen Ansatz mit der dynamischen Subiteration und dem revidiertem Momentenvektor, die schwarze Punkte stellen die experimentellen Resultate dar.

betrachtete Größe pro Zeitschritt maximal fortbewegt. Eine detaillierte Erläuterung der CFL-Zahl findet sich in Gl. (5.26) im Rahmen der Diskretisierung des konvektiven Terms in Kap. 5.

Im Rahmen vorliegender Arbeit wird eine von Sibra et al. vorgeschlagene CFL-ähnliche Subiteration, Gleichung (4.50), in die vorhandenen Massen- und Wärmetransfermodelle implementiert, um den Einfluss der gestiegenen Gasphasentemperatur auf die Wärme- und Massentransfermechanismen zu berücksichtigen:

$$\text{CFL}_{\text{evap}} = \frac{R_s \Delta t}{\Delta S} \leq 1. \quad (4.50)$$

R_s beschreibt hierbei die tropfenoberflächenabhängige Masstransferrate (Kap. 3.2.4) und $\Delta S = S(t + \Delta t) - S(t)$ die Veränderung der Tropfenoberfläche zwischen den Iterationen $t + \Delta t$ und t . Die Implementierung wurde hierbei derart gestaltet, dass die Subiteration dynamisch, d. h. in Abhängigkeit der Bedingung $\text{CFL}_{\text{evap}} \leq 0,9$, angewendet wird. Die Subiteration führt zwar zu einer Verbesserung der Stabilität und einer höheren Akkuratheit des Momentenflussvektors Ψ , geht jedoch mit einem Anstieg der Rechenzeit um ca. 5-10% einher. Ein ähnlich strukturierter Ansatz der Subiteration findet sich z. B. bei Laurent.

4.4.2 Angepasster Momentenvektor

In Anbetracht der reaktion-, und somit temperaturbedingt gesteigerten Wärme- und Massentransferprozesse ist der beschriebene EMSM-Algorithmus (Kap. (3.2.4)), mit dem im Rahmen dieser Arbeit gewählten Massen- und Wärmetransfermodell (Kap. 3.2.4), nicht in der Lage, die Verteilung der dispersen Phase im betrachteten Rechengebiet akkurat abzubilden, es treten starke Abweichungen zwischen den experimentellen und den numerischen Resultaten hinsichtlich der mittleren Durchmesser D_{10} , D_{20} , D_{30} und des Sauterdurchmessers D_{32} , sowie der Konzentration und des Volumenstroms der dispersen Phase auf. Als Beispiel sei an dieser Stelle auf die eingangs beschriebene Abb. 4.11 verwiesen, in der der bisherige Ansatz, der modifizierte Ansatz, sowie die experimentellen Resultate miteinander verglichen werden.

Als mögliche Gründe für die Abweichungen zwischen den experimentellen und numerischen Resultaten konnten folgende Aspekte bestimmt werden:

- Fehlerhafte Abschätzung des Momentenvektors $\mathbf{M}_{s,k}$,
- Nichterfüllung der Stabilitätsanforderungen der kanonischen Momente p_1 , p_2 und p_3 ,
- Mangelnde Exaktheit der Rekonstruktion der Verteilungsfunktion mit der Methode der maximalen Entropie,
- Überschätzung der Wärme- und Massentransferprozesse der dispersen Phase.

Obwohl die Anwendung der im vorhergehenden Abschnitt 4.4.1 beschriebenen dynamischen Subiteration die numerischen Resultate zwar tendentiell verbessert hat, ist die Aussagekraft der vorgestellten Methode nach wie vor nicht ausreichend gewesen.

Zur Einführung des Ansatzes eines angepassten Momentenflussvektors sei an dieser Stelle nochmals auf die zugrundeliegende Annahmen der DQbSMoM, nämlich die Unterteilung der Verteilungsfunktion in Sektionen, sowie auf die angewendeten Modellierungsstrategien verwiesen, siehe Kap. 3.2. Nachfolgend befindet sich eine Zusammenfassung der in Kap. 3.2.4 vorgestellten Methoden zum Transport im phasenbasierten Raum, da zur akkuraten Abbildung der Wärme- und Massentransferprozesse weitere Methoden, bzw. Modellierungsansätze benötigt werden.

ME-Methode – Die Methode der maximalen Entropie dient der Rekonstruktion der NDF. Da nur unzureichende Informationen zur Rekonstruktion zur Verfügung stehen, wird bei dieser Methode aus einer Vielzahl von Wahrscheinlichkeitsverteilungen eine Verteilung ausgewählt, die die größte Entropie besitzt und mit der Gesamtheit der verfügbaren Informationen übereinstimmt. Die ME-Methode basiert hierbei auf der Minimierung eines konvexen Potentials, als Lösungsansatz wird ein iteratives Newton-Verfahren angewendet.

Kanonische Momente – Kanonische Momente basieren auf einem skalaren Wahrscheinlichkeitsmaß in einem zu definierenden Momentenraum auf einem beschränkten Intervall. Anwendungsbezogen bedeutet das, dass bei Über- oder Unterschreiten eines Maximalwerts des kanonischen Moments erster, zweiter und dritter Ordnung von $p_n < 0,01$ oder $p_n > 0,99$, mit $n \in (1,2,3)$ der Momentenflussvektor Ψ über eine Sektionsgrenze ϕ_k , bzw. ϕ_{k-1} aus Stabilitätsgründen nicht berechnet wird.

PD-Algorithmus – Der PD-Algorithmus transformiert eine Sequenz von Momenten in Koeffizienten eines Kettenbruchs, aus denen wiederum die Gewichte und Abszissenwerte anhand eines entsprechenden Eigenwertproblems bestimmt werden können. Die Bibliotheken zur Lösung werden in Kap. 5.3 vorgestellt.

Massen- und Wärmetransferprozesse – Zur realitätsnahen Beschreibung der Massen- und Wärmetransfermechanismen wird das Abramzon-Sirignano-Modell verwendet. Dieses Modell beschreibt den temperatur- und strömungsbedingten Übergang von flüssigem zu verdampftem Brennstoff mit Ausbildung einer gasförmigen Schicht aus Brennstoff auf der Oberfläche des Tropfens.

Oben aufgeführte Methoden, bzw. Modellierungsansätze sind in den EMSM-Algorithmus eingebunden, der somit die Berechnung des Momentenflusses Ψ über die Sektionsgrenzen, die Rekonstruktion der verschobenen NDF $f(\phi, \mathbf{u}(\phi), T(\phi))$ mit dem ME-Algorithmus, sowie die Bestimmung der neuen Abszissenwerte – die neuen Quadraturpunkte – mit dem PD-Algorithmus beinhaltet. Zur Verbesserung der Akkuratheit der numerischen Resultate wurden u. A. folgende Strategien angewendet:

- Erhöhung der Anzahl an Newton-Iterationen im Rahmen der ME-Methode,
- Variation der Minimal- und Maximalwerte der kanonischen Momente von $p_n < 0,1, \dots, 0,7$ und $0,9$, bzw. $p_n > 0,2, \dots, 0,6$ und $0,8$, sowie ein kompletter Verzicht auf diese Stabilitätsbedingungen nach Vié et al.,
- Wahl eines anderen Löser für das Eigenwertproblem im Rahmen des PD-Algorithmus,
- Anpassung der verdampfungsrelevanten Parameter, wie z. B. der Referenzwerte T_{ref} und Y_{ref} und der thermodynamischen Parameter [87].

Eine qualitative Verbesserung der Simulationsergebnisse konnte jedoch erst durch die Implementierung der von Laurent beschriebenen »m-Momenten-Methode« erzielt werden. Die »m-Momenten-Methode« wurde in diesem Fall ebenfalls in einer sektionalen Momentenmethode, basierend auf der Williams-Spray-Gleichung, erstmalig beschrieben. Als numerische Konfiguration dient ein instationäres Spray mit polydispersem Charakter unter Berücksichtigung einer linearen Massentransferrate nach dem d^2 -Gesetz. Die Temperatur der Tropfen wird bei diesem Ansatz nicht bestimmt. Laurent verwendet dabei 100 Sektionen mit mindestens zwei Momenten zweiter und höherer Ordnung pro Sektion. Die Rekonstruktion der Verteilungsfunktionen f_k innerhalb der Sektionen erfolgt mit Polynomen, der Fokus liegt auf Erhaltung der Masse der dispersen Phase innerhalb der Sektionen und der Stetigkeit der Verteilungsfunktion, auch bei Vorliegen von diskontinuierlichen, oder im negativen Bereich liegenden Verteilungsfunktionen innerhalb einzelner Sektionen. Insgesamt stellt Laurent drei verschiedene Methoden zur Bestimmung des Momentenvektors \mathbf{M}_k vor:

Ein-Momenten-Methode – Der Momentenvektor \mathbf{M}_k wird auf dem Intervall s_{k-1} und s_k zwischen den Sektionsgrenzen abgeschätzt:

$$\mathbf{M}_k = \int_{s_{k-1}}^{s_k} f_k^{\text{ME}}(s) \begin{bmatrix} 1 \\ s \\ \vdots \\ s^{2N} \end{bmatrix} ds, \quad (4.51)$$

der Algorithmus zur Berechnung des modifizierten Momentenvektors ist vergleichbar zu dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten EMSM-Algorithmus.

Zwei-Momenten-Methode und modifizierte Zwei-Momenten-Methode – Der Momentenvektor einer Sektion mit der Breite ΔS_k wird mithilfe des Mittelpunkts einer Sektion $S_{k-1/2}$, sowie dem Abstand der Quadraturpunkte zum Mittelpunkt $\delta_{i,k}$ bestimmt:

$$\mathbf{M}_k = \mathbf{M}_{(k-1/2)} + \frac{\Delta S_k}{2} \delta_{i,k}. \quad (4.52)$$

Die modifizierte Zwei-Momenten-Methode wird für Ansätze mit geringerer Sektionsanzahl empfohlen und unterscheidet sich von der Zwei-Momenten-Methode durch die Approximation der Verteilungsfunktion innerhalb der Sektionen.

Von Interesse für die vorliegende Arbeit ist hierbei v. A. die Methode zur Rekonstruktion des Momentenvektors der Ein-Momenten-Methode – der bisher verfolgte Ansatz beinhaltet eine Approximation des Momentenvektors der Oberfläche $\mathbf{M}_{s,k}$ an den jeweils oberen Sektionsgrenzen einer Sektion s_k und s_{k-1} [53].

Im Folgenden wird der adaptierte Algorithmus der EMSM-Methode vorgestellt. Für die Anzahl N_s an Sektionen ergibt sich in Abhängigkeit der Tropfenoberfläche für die Sektionen $I_k = [s_{k-1}, s_k)$, ($k = 1, \dots, N_s-1$) und $I_{N_s} = [s_{N_s-1}, \infty)$ mit $s_0 = 0$ unter Berücksichtigung des gewählten Verdampfungsmodells folgender Algorithmus für jedes KV und jeden Zeitschritt Δt innerhalb der Momentenmethode mit der Schleife über alle Sektionen k von $k = N_s$ bis $k = 1$:

1. Rekonstruktion der NDF $f_k^{\text{ME}}(s)$ mithilfe der ME-Methode an den Sektionsgrenze s_{k-1} und s_k ;
2. Berechnung des Momentenvektors der Oberfläche \mathbf{M}_k in den Sektionsgrenzen s_{k-1} und s_k

$$\mathbf{M}_k = \int_{s_{k-1}}^{s_k} f_k^{\text{ME}}(s) \begin{bmatrix} 1 \\ s \\ \vdots \\ s^{2N} \end{bmatrix} ds; \quad (4.53)$$

3. Berechnung der Verdampfungsrate R_s an der unteren Grenzen der Sektion k und Bestimmung von $s_{\Delta t} = s_{k-1} - R_s \Delta t$;
4. Rekonstruktion der NDF mit den Momenten $\mathbf{M}_{s,k}$ unter Anwendung der ME-Methode und Bildung der kanonischen Momente:

$$p_1 = \frac{m_1 - \phi_{\min} m_0}{(\phi_{\max} - \phi_{\min}) m_0}, \quad (4.54)$$

$$p_2 = \frac{m_0 m_2 - m_1^2}{(m_1 - \phi_{\min} m_0)(\phi_{\max} m_0 - m_1)}, \quad (4.55)$$

$$p_3 = \frac{(\phi_{\max} m_0 - m_1)((m_1 - \phi_{\min} m_0) m_3 - (m_2 - \phi_{\min} m_1 - \phi_{\min}^2 m_0) m_2 - \phi_{\min}^2 m_1^2)}{(\phi_{\max} - \phi_{\min})(m_0 m_2 - m_1^2)((\phi_{\max} + \phi_{\min}) m_1 - m_2 - \phi_{\max} \phi_{\min} m_0)}; \quad (4.56)$$

Bedingung $p_n < 0,01$ und $p_n > 0,99$, ϕ_{\min} und ϕ_{\max} geben das Intervall der NDF an.

5. Numerische Integration des Momentenflussvektors

$$\Psi_{k-1}(\Delta t) = \int_{s_{k-1}}^{s_{\Delta t}} f_{\mathbf{M}_{s,k}}^{\text{ME}}(s) \begin{bmatrix} 1 \\ s \\ \vdots \\ s^{2N} \end{bmatrix} ds; \quad (4.57)$$

6. Berechnung des modifizierten Momentenvektors \mathbf{M}^*

$$\mathbf{M}^* = \mathbf{M}_k - \Psi_{k-1} + \Psi_k \quad \text{mit} \quad \Psi_{N_s} = 0; \quad (4.58)$$

7. Bestimmung der Gewichtungen $w_{k,n}$ und Abszissenwerte $s_{k,n}$ des angepassten modifizierten Momentenvektors \mathbf{M}^* unter Anwendung des PD-Algorithmus;
8. Berechnung der Verdampfungsrate R_S und der Änderung der Temperatur θ für jeden Abzissenwert $s_{k,n}$ mit der konditionierten Temperatur $T_{k,n}$;
9. Verschiebung der Abszisse $s_{k,n}(t + \Delta t) = R_S \Delta t + s_{k,n}(t)$ und $T_{k,n}(t + \Delta t) = \theta \Delta t + T_{k,n}(t)$;
10. Bestimmung von $d_{k,n}$ anhand von $s_{k,n}$;

Durch die Anwendung dieser, für reaktive Strömungen adaptierten, Methode konnte die Aussagekraft der numerischen Resultate signifikant verbessert werden, wie in Kap. 6 vorgestellt.

5 Numerische Umsetzung

Basierend auf den Erhaltungs- und Transportgleichungen für ein- und mehrphasige Fluide in Kapitel 2, sowie den Ansätzen der Verbrennungsmodellierung in Kap. 4 werden in diesem Kapitel die zugrundeliegenden Berechnungsverfahren zur numerischen Lösung der Gleichungen vorgestellt. Eine analytische Lösung ist aufgrund der Komplexität der Problemstellung im Allgemeinen nicht möglich. Die allgemeine Vorgehensweise beinhaltet eine Aufteilung der Geometrie der zugrundeliegenden Konfiguration in eine Vielzahl kleinerer Teilgebiete, einer räumlichen und zeitlichen Diskretisierung der verwendeten Transportgleichungen, um eine Lösung der Fragestellung in Abhängigkeit der gegebenen Randbedingungen zu berechnen. Das Kapitel ist hierzu in drei Unterkapitel gegliedert, ausgehend von Methoden zur räumlichen Diskretisierung des Rechengebiets mit der Finite-Volumen-Diskretisierung, Kap. 5.1, werden Lösungsstrategien für die implementierten Transportgleichungen vorgestellt. Die Transportgleichungen werden hierzu entsprechend in den konvektiven, den diffusiven und den transienten Term aufgespalten, der entstehende Diskretisierungsfehler wird am Ende des Unterkapitels beschrieben. Ein Überblick über die approximativen Lösungsverfahren für nicht-lineare, gekoppelte Problemstellungen ist in Abschnitt 5.2 zu finden. Den Abschluss bildet eine Übersicht über das numerische Gesamtverfahren, Abschnitt 5.3, mit der Behandlung des Drucks, bzw. Vorstellung des angewendeten Druckkorrekturverfahrens, der Erhaltung der Masse, sowie des *operator-splitting*-Ansatzes.

Der dieser Arbeit zugrunde liegende CFD-Code *PreciseUNS – Predictive-System for Real Engine Combustors with Improved Sub-models and Efficiency Unstructure* – basiert auf dem inkompressiblen CFD-Code *Dolfyn* und wird u. a. in Kooperation mit der *Rolls-Royce Deutschland* weiterentwickelt. Die Zusammenarbeit mit *Rolls-Royce* und Weiterentwicklung des Codes erfolgt im Rahmen der *University Technology Centre (UTC)*, mit Fokus auf der Spray- und Verbrennungsmodellierung. *PreciseUNS* ist in der Programmiersprache *Fortran* geschrieben und unterstützt unstrukturierte Rechengitter, wie sie aufgrund der Größe und der geometrischen Eigenschaften in realitätsnahen Problemstellungen im Rahmen der Finiten-Volumen-Methode Anwendungen finden. Zur Verkürzung der Rechenzeit, bzw. um größere und/oder komplexere Fragestellungen lösen zu können, wird eine Parallelisierung auf mehrere Prozessoren angewendet. Hierbei erfolgt eine Zerlegung des Rechengebiets entsprechend der Prozessoranzahl, wobei jedem Prozessor ein Teil des Rechengebiets von z. B. gleicher Größe, oder auch vergleichbarer Masse der dispersen Phase, zugewiesen wird. Anwendung bei der Zerlegung findet hierbei das Softwarepaket *ParMETIS* [69]. *ParMETIS* regelt hierbei den Informationsaustausch zwischen den Blöcken des zerlegten Rechengebiets basierend auf dem *MPI*-Standard (Message Passing Interface) [33].

5.1 Finite-Volumen-Diskretisierung

Die Finite-Volumen-Diskretisierung wurde zur numerischen Lösung von strömungsmechanischen Problemstellungen Anfang der 70er Jahre entwickelt und stellt die Grundlage vieler CFD-Berechnungen dar. Ausgangspunkt für eine Finite-Volumen-Diskretisierung ist eine Zerlegung des Problemgebietes in eine finite Anzahl einzelner, nicht überlappender, kleinerer Volumen, den sogenannten KV. Die als Integral über das Volumen formulierten Erhaltungs- und Transportgleichungen gelten für jedes KV. Mit Anwendung des Gaußschen Integralsatzes werden aus Volumenintegrale richtungsabhängige Oberflächenintegrale über jede Kontrollvolumenseite formuliert. Durch Summation der jeweiligen Gleichungen über alle KV des Rechengebietes, erhält man eine Gleichung, die für das gesamte Rechengebiet Gültigkeit besitzt. Somit ist per se eine physikalisch geforderte, globale Konservativität, d. h. Erhaltung der Masse, vorhanden, was einer der wesentlichen Vorteile dieser Methode ist. Abbildung 5.1 dient der Darstellung der

gebräuchlichen Kompassnotation zur Bezeichnung der KV innerhalb eines numerischen Rechengitters. Im Mittelpunkt eines KV liegt der Rechenknoten, an dem die Variablenwerte bestimmt werden. Sog. Interpolationsverfahren werden angewendet, um die Variablenwerte auf den Kontrollvolumenoberflächen mittels der Knotenwerte eines KV, ggf. auch unter Einbeziehung weiterer KV, auszudrücken. Als Ergebnis erhält man für jedes KV algebraische Gleichungen, in denen die Variablenwerte aus dem Rechenknoten, sowie – entsprechend dem gewählten Diskretisierungsverfahren – aus benachbarten KV vorkommen. Im Zentrum jedes KV liegt der eingangs erwähnte Rechenknoten, in dem die Variablen φ bestimmt werden. Die Bezeichnungen sind auch für nicht-orthogonale Rechengitter anwendbar. Ausgehend von der, dieser Arbeit zugrunde liegenden, Finite-Volumen-Diskretisierung wird im weiteren Verlauf auf grundlegende Aspekte der Topologie des Rechengitters nach [32, 113, 114] zur Differenzierung eingegangen.

Strukturierte Rechengitter – Strukturierte Rechengitter mit einheitlicher Topologie weisen Vorteile in Form eines »geringen« Programmier- und Rechenaufwands zur Erzeugung der KV auf. Die Datenspeicherung, sowie die Lösung des Gleichungssystems ist aufgrund der Nachbarschaftsbeziehungen mit einem vergleichsweise geringen numerischen Aufwand verbunden. Insbesondere hinsichtlich der Parallelisierung können effiziente Zerlegungsansätze für das Rechengebiet gewählt werden, Einschränkungen treten jedoch bei geometrisch komplexeren Rechengebieten auf.

Unstrukturierte Rechengitter – Unstrukturierte Rechengitter besitzen keine festgelegte Topologie und sind daher flexibel einsetzbar. Zudem lassen sich unstrukturierte Rechengitter, auch unter Berücksichtigung lokaler Verfeinerungen, automatisch generieren. Als nachteilig ist der höhere Speicher- und Rechenaufwand aufgrund variierender Nachbarschaftsbeziehung und möglicher nicht-orthogonaler KV einzustufen.

Blockstrukturierte Rechengitter – Blockstrukturierte Rechengitter bestehen aus sog. »Blöcken« mit lokal strukturierten Rechengittern, müssen jedoch global keine strukturierte Topologie aufweisen. Diese Hybridmethode bietet einen Kompromiss zwischen den Vorteilen strukturierter Rechengitter beim Rechen- und Speicheraufwand, sowie der Vorteile unstrukturierter Rechengitter, komplexe Geometrien abzubilden. Somit lassen sich reguläre Datenstrukturen innerhalb der einzelnen Blöcke nutzen und dabei die Blöcke so konstruieren, dass sie die irregulären Gebiete anhand von Kopplungen der Rechengitter erfassen können. Lokale Verfeinerungen der Auflösung des Rechengitters, z. B. an Ein- oder Ausstromrändern, lassen sich mit dieser Methode ebenfalls realisieren.

Allgemeingültig zu beachtende Aspekte bei der Generierung eines Rechengitters beziehen sich auf das Längen-Seiten-Verhältnis eines KV, sowie auf die sog. Schiefheit der KV zueinander, um Diskretisierungsfehler zu vermeiden. Anzustreben ist eine gitterunabhängige, d. h. von der Größe der einzelnen KV unabhängige, Lösung [32, 113, 114].

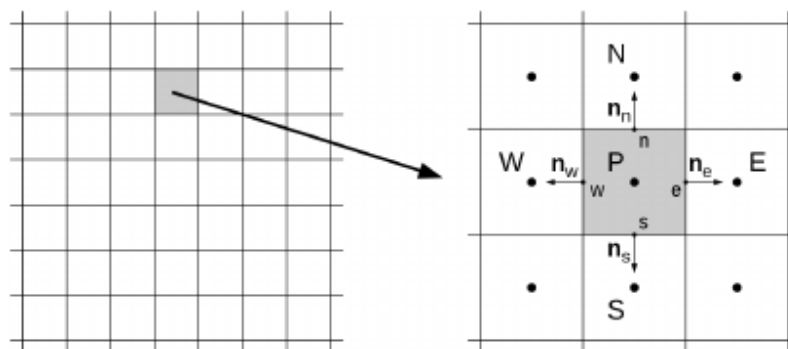


Abbildung 5.1: Kompassnotation der Kontrollvolumen mit den entsprechend bezeichneten Werten im Zentrum, auf den Seitenflächen und in den benachbarten Kontrollvolumen.

Zusätzlich zur Diskretisierung des Rechengebiets und der Transportgleichungen werden zum Lösen einer Problemstellung Randbedingungen benötigt – in der Fachliteratur wird dies als Randwertproblem bezeichnet. Randwertprobleme stellen eine Klasse von Problemstellungen dar, bei denen zu einer vorgegebenen Differentialgleichung Lösungen gesucht werden, die auf dem Rand des Definitionsbereiches vorgegebene Funktionswerte annehmen sollen. Grundlegend wird zwischen zwei unterschiedliche Möglichkeiten auf dem Rand des Rechengebietes Werte – z. B. für die Ein- oder Ausstromrändern als Randbedingungen – vorzugeben unterschieden.

Dirichlet-Randbedingung – Als Dirichlet-Randbedingung bezeichnet man im Zusammenhang mit Differentialgleichungen Werte für die relevanten Skalare, die auf dem jeweiligen Rand des Definitionsbereichs von der Funktion angenommen werden sollen.

Neumann-Randbedingung – Eine Neumann-Randbedingung bezeichnet hingegen Werte, die auf dem Rand des Definitionsbereichs für die erste Ableitung der Lösung vorgegeben werden.

Diese Vorgabewerte werden vor dem Start der Simulation, zum Zeitpunkt $t = 0$ für sämtliche Skalare, als Startbedingung gesetzt. Im Idealfall stellen die Startbedingungen eine gute Näherung des zu erwartenden quasi-stationären Strömungszustandes innerhalb des Rechengebiets dar. Diese Forderung ist bei komplexen Problemstellungen allerdings zumeist nur sehr schwer erfüllbar.

Gleichung (5.1) stellt ein allgemeines Beispiel einer generischen, instationären Transportgleichung in Differentialform dar. Transportgleichungen sind partielle, nichtlineare Differentialgleichung der bilanzierten Größe φ , z. B. der Temperatur T oder einer Geschwindigkeit u , und weisen vier charakteristische Terme auf:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varphi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) + S_\varphi. \quad (5.1)$$

Obige Gleichung (5.1) steht symbolisch für die numerische Lösung der Erhaltungs-, bzw. Transportgleichungen der Massen, des Impulses, der Enthalpie und einer Spezies im Kapitel 2 auf dem Rechengitter. Eine Integration über ein beliebiges KV innerhalb des Rechengitters mit dem Volumen V führt zu folgendem Ausdruck:

$$\underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) dV}_T + \underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varphi) dV}_C = \underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) dV}_D + \underbrace{\int_V S_\varphi dV}_S, \quad (5.2)$$

wobei \mathcal{T} den transienten Term beschreibt, \mathcal{C} den konvektiven Term, \mathcal{D} den diffusiven Term und \mathcal{S} den sog. Quell- oder Senkterm. Der konvektive Term wird hierbei durch den Transport der bilanzierten Größe φ mit der Strömungsgeschwindigkeit u_i verursacht. Der diffusive Term resultiert aus den Gradienten und wird durch Diffusionskoeffizienten D_φ dominiert. Der Quell- oder Senkterm resultiert z. B. aus Wärme- und Massentransferprozessen und wird gesondert betrachtet. Der Wert von φ für den transienten Term \mathcal{T} und für den Quell- oder Senkterm \mathcal{S} werden direkt mithilfe der Mittelpunktsregel im Mittelpunkt des Kontrollvolumens approximiert:

$$\mathcal{T} = \int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) dV \approx \left. \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) \right|_p \delta V, \quad (5.3)$$

$$\mathcal{S} = \int_V S_\varphi dV \approx S_\varphi|_p \delta V. \quad (5.4)$$

δV gibt in obigen Gleichungen das Volumen einer Zelle an. Das Volumenintegral des konvektiven und diffusiven Terms wird mithilfe des Gaußschen Integralsatzes approximiert – dieser definiert den

Zusammenhang zwischen der Divergenz eines Vektorfelds und, dem durch das Feld vorgegebenen, Fluss durch eine geschlossene Oberfläche:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \varphi) dV = \int_S (\rho u_i \varphi) n_i dS, \quad (5.5)$$

wobei n_i die i -te Komponente des orthogonal auf den Seitenflächen S stehenden Normalvektor angibt. Eine Anwendung von Gl. (5.5) auf den konvektiven Term \mathcal{C} und den diffusiven Term \mathcal{D} ergibt folgende Ausdrücke:

$$\mathcal{C} = \int_{\delta V} \rho u_i \varphi n_i dS \approx \sum_c \rho u_i \varphi n_i|_c \delta S_c, \quad (5.6)$$

$$\mathcal{D} = \int_{\delta V} \left(D_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) n_i dS \approx \sum_c \left(D_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) n_i|_c \delta S_c. \quad (5.7)$$

Innerhalb eines KV gibt c die jeweilige Oberfläche an; mit der Summe aus $c = n, e, s, w$ für die Zelle in Abb. 5.1 ergibt sich somit die Oberfläche δS_c .

5.1.1 Diskretisierungsfehler

Im Rahmen der Approximation von Differentialgleichungen in Form von Erhaltungs- und Transportgleichungen entstehen sogenannte Diskretisierungsfehler. Diese Fehler resultieren aus dem vorzeitigen Abbruch der Taylorreihen und führen zum Abbruchfehler, die wiederum zu einer Differenz zwischen der exakten Lösung der Differentialgleichungen und der tatsächlichen Lösung der diskretisierten Gleichungen führen können (siehe Gl. (5.8)):

$$F(\varphi) = F_{\Delta h}(\varphi) + \tau_{\Delta h}. \quad (5.8)$$

In obiger Gleichung bezeichnet $F(\varphi)$ die exakte Lösung der Differentialgleichung, $F_{\Delta h}(\varphi)$ die tatsächliche Lösung der diskretisierten Gleichungen mit einer allgemein definierten Rechengitterweite Δh und $\tau_{\Delta h}$ den sog. Abbruchfehler, auch Residuum genannt. Für ein Skalar φ ergibt sich dementsprechend [32]:

$$\varphi = \varphi_{\Delta h} + \epsilon_{\Delta h}, \quad (5.9)$$

mit der tatsächlichen Lösung $\varphi_{\Delta h}$ und dem Diskretisierungsfehler $\epsilon_{\Delta h}$, der die Differenz zwischen der exakten Lösung der Gleichung φ und der exakten Lösung der diskretisierten Gleichung angibt – eine exakte Lösung der Differentialgleichung ist jedoch in den meisten Problemstellungen nicht bekannt. Für lineare Problemstellungen lässt sich jedoch herleiten, dass der Diskretisierungsfehler in Abhängigkeit zum Abbruchfehler steht. Mithilfe einer Richardson-Extrapolation kann mit den numerischen Resultaten aus den Berechnungen auf Rechengittern unterschiedlicher Rechengitterweiten, Δh , $2\Delta h$, sowie $4\Delta h$, eine Abschätzung des Diskretisierungsfehlers vorgenommen werden [114]:

$$\varphi = \varphi_{\Delta h} + C \Delta h^p + O(\Delta h^p). \quad (5.10)$$

In Gl. (5.10) gibt C eine gitterunabhängige Konstante an, der Diskretisierungsfehler $\epsilon_{\Delta h}$ ist proportional zur p -ten Potenz der Rechengitterweite. Unter Berücksichtigung der numerischen Resultate auf unterschiedlichen Rechengitterweiten und bei Anwendung einer Extrapolation zur Abschätzung des

Diskretisierungsfehlers unter Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung, lassen sich Aussagen über die Ordnung p einer Methode treffen:

$$p = \frac{\log\left(\frac{\varphi_{2\Delta h} - \varphi_{4\Delta h}}{\varphi_{\Delta h} - \varphi_{2\Delta h}}\right)}{\log 2}. \quad (5.11)$$

Unter Zuhilfenahme der Ordnung p aus Gl. (5.11) und einer Abschätzung der Konstanten C ergibt sich für den Diskretisierungsfehler $\epsilon_{\Delta h}$:

$$\epsilon_{\Delta h} \approx \frac{\varphi_{\Delta h} - \varphi_{2\Delta h}}{2^p - 1}. \quad (5.12)$$

Eine gitterunabhängige und somit konvergierende Lösung kann somit über:

$$\varphi \approx \varphi_{\Delta h} + \frac{\varphi_{\Delta h} - \varphi_{2\Delta h}}{2^p - 1} \quad (5.13)$$

angenähert werden.

5.1.2 Diskretisierung des konvektiven Terms

Zur Diskretisierung des konvektiven Terms C werden in vorliegender Arbeit zwei angewendete Verfahren vorgestellt. In *PreciseUNS* kann auf das *Upwind Differencing Scheme* (UDS) und das *Central Differencing Scheme* (CDS) zurückgegriffen werden. Die Notation entspricht hierbei Abb. 5.1 unter Berücksichtigung einer infinitesimal kleine Oberfläche δS_c ergibt sich für die Summe der konvektiven Flüsse durch die Oberfläche des Kontrollvolumens:

$$C \approx \sum_c (\rho u_i \varphi) n_i|_c \delta S_c = \sum_c \dot{m}_c \varphi_c. \quad (5.14)$$

φ wird in den Zentren der Kontrollvolumen berechnet, der Wert für φ_w auf der Seitenflächen wird dementsprechend über die Werte in den Zentren der Kontrollvolumen der benachbarten Kontrollvolumen φ_w approximiert. Nachfolgend werden drei Diskretisierungsverfahren vorgestellt; Die Upwind-Interpolation, das Zentralsdifferenzen-Verfahren, sowie das Flux-Blending-Verfahren als ein hybrider Ansatz zwischen beiden Methoden, die im Rahmen dieser Arbeit Anwendung finden. Die angewendeten Verfahren werden dabei am Beispiel des Werts auf der westlichen Seitenfläche φ_w nach Kompassnotation vorgestellt. Die Ordnung eines Verfahrens wird zumeist mithilfe einer Taylor-Reihen-Entwicklungen abgeschätzt [32]. Der Abbruchfehler steht in Abhängigkeit der Auflösung des Rechengitters und ist proportional zum, mit der Ordnung p potenzierten, Abstand zu den Zentren benachbarter Kontrollvolumen.

Upwind-Interpolation

Die Interpolation im Rahmen des UDS des Werts φ_e auf der östlichen Seite erfolgt anhand des stromauf, bzw. stromab von φ_e gelegenen Knoten φ_E , bzw. φ_P . Bedingt durch diese Struktur erfolgt der Informationsaustausch lediglich in eine Richtung:

$$\varphi_e \approx \begin{cases} \varphi_P & , \text{ wenn } \dot{m}_e > 0, \\ \varphi_E & , \text{ wenn } \dot{m}_e < 0. \end{cases} \quad (5.15)$$

Das UDS gehört zu den Verfahren erster Ordnung. Durch Einbeziehung weiterer Knoten werden Verfahren höherer Ordnung, wie das QUICK-Verfahren, realisiert. Das UDS-Verfahren ist nach Ferziger u. Perić [32] das einzige Approximationsverfahren, das bedingungslos die Beschränktheitsanforderung erfüllt, d. h. bei dem oszillierende Lösungen ausgeschlossen sind.

Zentralknoten-Verfahren

Das Zentralknoten-Verfahren stellt eine lineare Interpolation zwischen zwei Werten innerhalb des Rechengitters dar und leitet sich von Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzen-Verfahren ab, beide Verfahren sind bei Ferziger u. Perić [32] näher erläutert. Die numerische Interpolation im Rahmen des CDS erfolgt anhand der angrenzenden Werte in den Kontrollvolumenzentren. Für das Beispiel des Werts φ_w auf der westlichen Kontrollvolumenseite ergibt sich daher:

$$\varphi_w \approx \varphi_w \gamma_w + \varphi_p (1 - \gamma_w). \quad (5.16)$$

Der Interpolationsfaktor γ_e wird hierbei aus dem Quotient des Zentrumsabstands bestimmt:

$$\gamma_e = \frac{x_w - x_p}{x_w - x_p}. \quad (5.17)$$

Für äquidistante Rechengitter mit einer Schrittweite Δx , bzw. Δy ergibt sich $\gamma_w = 1/2$. Die dargestellte Methode besitzt sowohl für äquidistante, als auch für nicht-äquidistante Rechengitter einen Interpolationsfehler zweiter Ordnung. Mithilfe einer Taylorreihenentwicklung und zusätzlicher Terme wird ersichtlich, dass der führende Fehlerterm quadratisch von der Rechengitterweite abhängt (siehe hierzu [114]). Durch Einbeziehung zusätzlicher, entfernter liegender Punkte des Rechengitters lassen sich Verfahren höherer Ordnung formulieren [32].

Flux-Blending-Verfahren

Eine Besonderheit stellen sogenannte *Flux-Blending*-Verfahren dar, sie beschreiben die Kombination Verfahren niedrigerer (LS) und höherer (HS) Ordnung:

$$\varphi_w \approx (1 - \beta) \varphi_w^{LS} + \beta \varphi_w^{HS} = \varphi_w^{LS} + \beta (\varphi_w^{HS} - \varphi_w^{LS}). \quad (5.18)$$

»LS« steht hierbei für das Verfahren niedrigerer Ordnung, »HS« bezeichnet das Verfahren höherer Ordnung und β den Gewichtungsfaktor zwischen beiden Verfahren. Blending-Faktor $\beta \in [0,1]$. Sofern in Gleichung (5.18) $\beta = 0$ gesetzt wird, entspricht das Verfahren der Approximation niedrigerer Ordnung, für $\beta = 1$ jedoch der Approximation höherer Ordnung. *Flux-Blending*-Verfahren stellen somit eine Kombination aus der Robustheit eines Verfahrens niedrigerer Ordnung mit der Akkuratheit eines Verfahrens höherer Ordnung dar. Um die Stabilitätseigenschaften des Verfahrens zu verbessern, wird die Approximation niedrigerer Ordnung implizit behandelt, der Term $\beta (\varphi_e^{HS} - \varphi_e^{LS})$ wird hingegen explizit – d. h. mit Werten der vorangegangenen Iteration – behandelt. In der Literatur wird ein Wert für den Blending-Faktor von $\beta = 0,7, \dots, 0,9$ angegeben, in der vorliegenden Simulation wird ein Wert von $\beta = 0,7$ angenommen.

Korrektur der Interpolation

In verzerrten, bzw. nicht-orthogonalen Rechengittern kann sowohl eine Upwind-Interpolation, als auch ein Zentralknotenverfahren zu fehlerhaften Resultaten führen. Beispielfhaft sei an dieser Stelle auf die skalare Größe φ_w auf der westlichen Oberfläche eines verzerrten Kontrollvolumens, siehe Abb. 5.2, verwiesen. Entsprechend Abbildung 5.2 ergibt eine lineare Interpolation einen verfälschten Wert φ'_w anstelle des zu erwartenden, korrekten Werts φ_w auf der westlichen Oberfläche des Kontrollvolumens. Um die Akkuratheit des Interpolationsverfahrens auch bei verzerrten Rechengittern zu gewährleisten, wird der interpolierte Wert für φ an der Seitenfläche w mit einer auf dem Gradienten an der Stelle w' basierenden Formulierung korrigiert:

$$\varphi_w \approx \varphi'_w + \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \bigg|_{w'} (x_{i,w} - x_{i,w'}). \quad (5.19)$$

Diese Korrektur ist für gleichmäßig größer werdende Rechengitter nicht notwendig [32].

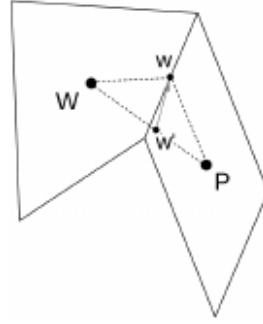


Abbildung 5.2: Korrektur der Interpolation bei verzerrten Kontrollvolumen mit dem verfälschten Wert φ'_w , sowie korrekten Werts φ_w

Verfahren höherer Ordnung

Im Rahmen der DQbSMoM werden zwar bisher ausschließlich das UDS- und das CDS-Verfahren angewendet, aber sowohl in der angegebenen Literatur, als auch in *PreciseUNS* werden Interpolationsmethoden höherer Ordnung aufgeführt. Beispielhaft sei zum Einen an dieser Stelle auf das *Quadratic Interpolation for Convective Kinematic* (QUICK)-Verfahren, und zum Anderen auf CDS-Verfahren höherer Ordnung unter Einbeziehung weiterer Kontrollvolumen verwiesen. Das QUICK-Verfahren basiert hierbei auf der Berücksichtigung weiterer Kontrollvolumen stromauf-, bzw. stromabwärts für die Interpolation von φ [32, 114]. In *PreciseUNS* ist darüber hinausgehend sowohl das TVD-Verfahren (Total variation diminishing) verfügbar, wobei das Interpolationsverfahren in Abhängigkeit vom Verhalten der Lösung gewählt wird. TVD-Verfahren sind hierbei in der Lage, Sprünge und Diskontinuitäten ohne numerische Oszillationen abzubilden. Eine Übersicht der verschiedenen TVD-Methoden ist z. B. bei [78] zu finden.

5.1.3 Berechnung der Gradienten

Der Gradient einer skalaren Größe φ , siehe Gl. (5.6), wird auf Basis des Gauss-Theorems berechnet. $\partial\varphi/\partial x_i$ gibt hierbei die Divergenz des Vektors φi an, wobei alle Koeffizienten des Vektors i zu eins gesetzt werden [32]:

$$\int_V \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dV = \int_{\partial V} \varphi i n_i dS \approx \sum_c \varphi i n_i|_c \delta S_c. \quad (5.20)$$

Die Approximation des Volumenintegrals erfolgt mithilfe der Mittelpunkregel, der Gradient von φ wird beschrieben durch:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}|_P \approx \frac{1}{\delta V} \sum_c \varphi_c \delta S_c. \quad (5.21)$$

Dieser Berechnungsansatz verliert auch für unstrukturierte Rechengitter nicht seine Gültigkeit.

5.1.4 Diskretisierung des diffusiven Terms

Zur Diskretisierung des diffusiven Terms \mathcal{D} (Gl. (5.7)) einer Transportgleichung wird zumeist ein vom CDS-Verfahren (Kap. 5.1.2) abgeleitetes Verfahren, angewendet:

$$\mathcal{D} = \sum_c \left(D_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) n_i \Big|_c \delta S_c = \sum_c D_{\varphi_c} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \Big|_{n_{i,c}} \delta S_c. \quad (5.22)$$

In vorliegendem Fall wird der Gradient von φ an den jeweiligen Seitenflächen des Kontrollvolumens mithilfe einer, auf dem Gauss-Theorem basierenden CDS-Differentiation 5.22, bestimmt. Nach dem Berechnen der Gradienten in den Mittelpunkten der Kontrollvolumen φ_P wird der Gradient von φ auf der Seitenfläche entsprechend (5.16) linear interpoliert:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_w \approx \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_w \gamma_w + \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_P (1 - \gamma_w). \quad (5.23)$$

Der Interpolationsfehler liegt bei diesem Verfahren im Bereich der zweiten Ordnung. Bei der Verwendung der CDS-Differentiation, wie in Gl. (5.23) dargestellt, können jedoch numerische Oszillationen auftreten, die wiederum durch die Verwendung eines expliziten und eines impliziten Lösungsanteils vermieden werden können. Eine Approximation von $\partial\varphi/\partial x_i$ ist gegeben durch:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_w = \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_w^{\text{implizit}} + \left(\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_w^{\text{explizit}} - \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_w^{\text{implizit}} \right). \quad (5.24)$$

Der erste Term der rechten Seite wird implizit – d. h. mit einem bis dahin unbekannten Ergebnis der Ableitung – gelöst, der zweite Term hingegen wird mit der bekannten Lösung explizit gelöst. Der implizite Anteil dieser Interpolationsmethode wird benötigt, um die Koeffizientenmatrix zu erstellen, der explizite Anteil beeinflusst hingegen die Akkuratheit des Verfahrens. Diese Vorgehensweise ähnelt Flux-Blending-Verfahren zur Diskretisierung der konvektiven Flüsse mit dem Faktor $\beta = 1$, siehe Gl. (5.18) in Kap. 5.1.2. Bei der numerischen Differentiation werden die unbekannten Ableitungen in *PreciseUNS* für die implizite Approximation auf den Seitenflächen anhand der bekannten Werte der Koordinaten x und der Rechengitterweite Δx , sowie der Strömungsgrößen in den benachbarten KV approximiert:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_w^{\text{implizit}} \approx \frac{\varphi_W - \varphi_P}{x_W - x_P} = \frac{\varphi_W - \varphi_P}{\Delta x_i}. \quad (5.25)$$

Wie das CDS zur Diskretisierung der konvektiven Flüsse, weist auch obiges Diskretisierungsschema für den Fall eines äquidistanten Rechengitters einen Abbruchfehler zweiter Ordnung auf. Für den Fall eines nicht-äquidistanten Rechengitters ist der führende Fehlerterm proportional zur Rechengitterweite und dem Expansionsverhältnis ζ benachbarter Abstände des Rechengitters. Dies bedeutet, dass der Anteil des Fehlerterms für ein Expansionsverhältnis ζ ungleich eins dominanter wird [114]. Weitere Verfahren zur Diskretisierung des diffusiven Terms finden sich u. a. bei Schäfer [114, S. 81].

5.1.5 Diskretisierung des transienten Terms

Technische Problemstellungen sind in der Regel von instationären Prozessen, wie z. B. Anfahr- oder Lastwechselvorgängen beeinflusst. Bei der Berechnung instationärer Strömungen muss daher, zusätzlich zu den Transportgleichungen, der transiente Term \mathcal{T} aus Gl. (5.3) berücksichtigt und diskretisiert werden. Die zeitliche Abhängigkeit stellt hierbei eine gesondert zu betrachtende Größe dar, denn sie hat nur eine Ausbreitungsrichtung. Im Allgemeinen wird zwischen expliziten und impliziten Verfahren, wie bereits in Gl. (5.24) aufgeführt, unterschieden. Bei expliziten Verfahren erfolgt die Diskretisierung anhand bereits bekannter Zeitpunkte t_{n-1} , bei impliziten Verfahren unter Einbindung noch unbekannter Zeitpunkte t_{n+1} :

$$\varphi^{n+1} = \begin{cases} f(\varphi^n, \varphi^{n-1}, \dots) & \text{explizite Zeitdiskretisierung.} \\ f(\varphi^{n+1}, \varphi^n, \varphi^{n-1}, \dots) & \text{implizite Zeitdiskretisierung.} \end{cases}$$

Desweiteren wird zwischen sog. Ein-Schritt-Verfahren mit Berücksichtigung eines Zeitschritts Δt und Mehr-Schritt-Verfahren unterschieden. Die vorgestellten Beispiele gelten unter Berücksichtigung einer konstanten Zeitschrittweite Δt im Laufe der Simulationen und es wird eine vereinfachende Schreibweise mit der Notation $\varphi(t_n) = \varphi^n$, bzw. $\varphi(t_{n+1}) = \varphi^{n+1}$ eingeführt. Ein wichtiges Kriterium für die Stabilität numerischer Simulationen ist die sog. CFL-Zahl. Diese Kennzahl beschreibt, um welche Länge Δx eine betrachtete Größe φ pro Zeitschritt Δt durch Konvektion transportiert wird:

$$\text{CFL} = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \leq \text{CFL}_{\max}. \quad (5.26)$$

In Gl. (5.26) bezeichnet u die Strömungsgeschwindigkeit. Aus einer Stabilitätsuntersuchung ergibt sich, dass bei Anwendung rein expliziter ausgerichteter Verfahren durch geeignete Wahl des Zeitschritts Δt oder der Rechengitterweite Δx die maximale CFL-Zahl stets kleiner 1 sein muss, um eine stabile und konvergente Lösung zu erzielen. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der skalaren Informationen auf dem Rechengitter ist somit kleiner als die physikalische Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Störung. Im Gegensatz hierzu sind implizite Verfahren auch noch bei weit größeren CFL-Zahlen stabil. In *PreciseUNS* wird eine implizite Diskretisierung des transienten Terms \mathcal{T} angewendet. Sämtliche Flüsse und Quellterme der diskretisierten Transportgleichungen werden mithilfe des bis dahin noch unbekannten Zeitschritts $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ ermittelt, wobei zwei Methoden, Gl. (5.27) und (5.28), zur Auswahl stehen. Zu den Einschrittverfahren zählt z. B. die implizite Euler-Methode:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} \approx \frac{\varphi(t_{n+1}) - \varphi(t_n)}{\Delta t}, \quad (5.27)$$

die ihrerseits einen gängigen Ansatz mit einem Diskretisierungsfehler erster Ordnung darstellt. Mehrschrittverfahren bieten aufgrund der Einbeziehung mehrerer Zeitpunkte eine höhere Genauigkeit als die Euler-Methode, in *PreciseUNS* ist die *three-time-level*-Methode hinterlegt:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} \approx \frac{3\varphi(t_{n+1}) - 4\varphi(t_n) + \varphi(t_{n-1}))}{2\Delta t}. \quad (5.28)$$

Die *three-time-level*-Methode bietet insbesondere Vorteile bei unstrukturierten Rechengittern und weist einen Diskretisierungsfehler zweiter Ordnung auf.

5.2 Lösungsverfahren

Die im vorangegangenen Kapitel beschriebenen Diskretisierungsverfahren des konvektiven, diffusiven und transienten Terms einer Transportgleichung, führen auf ein System algebraischer Gleichungen, die entsprechend den zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen linear oder nicht-linear sein können. Diskretisierungsverfahren numerischer Lösungsansätze führen zu dünnbesetzten Systemen algebraischer Gleichungen – die Lösung dieser Matrizen ist essentieller Bestandteil eines Berechnungsverfahrens. Im nicht-linearen Fall bietet sich die Lösung der diskretisierten Gleichungen mit iterativen Verfahren an, bei denen in mehreren Berechnungsschritten der Abbruchfehler minimiert wird.

Im folgenden Abschnitt werden einige Methoden zur Lösung linearer und nicht-linearer Gleichungssysteme beschrieben, die sich bei Verwendung von strukturierten Rechengittern ergeben. Als Beispiel sei eine stationäre Problemstellung unter Berücksichtigung der Kompassnotation angeführt, mit Summe über alle betrachteten KV c ergibt sich:

$$a_p \varphi_p - \sum_c a_c \varphi_c = b_p. \quad (5.29)$$

Die aus partiellen Differentialgleichungen erhaltenen Matrizen sind in der Regel »dünn« besetzt, d. h. eine Vielzahl der Elemente der Nebendiagonalen sind gleich null. Die diagonal-dominante Matrizenstruktur des Rechengitters wirkt sich hierbei vorteilhaft auf das Lösungsverfahren aus [114]. Aus der zweidimensionalen Gleichung (5.29) ergibt sich mit den Geschwindigkeitsvektoren u_x in x -, und u_y in y -Richtung, sowie dem Diffusionskoeffizienten D für ein stationäres Problem bei Anwendung der Mittelpunktsregel:

$$\left(\rho u_y \varphi_P - D \frac{\varphi_N - \varphi_P}{y_N - y_P} \right) (x_e - x_w) + \left(\rho u_x \varphi_P - D \frac{\varphi_E - \varphi_P}{x_E - x_P} \right) (y_n - y_s) - \left(\rho u_y \varphi_P - D \frac{\varphi_P - \varphi_S}{y_P - y_S} \right) (x_e - x_w) - \left(\rho u_x \varphi_P - D \frac{\varphi_P - \varphi_W}{x_P - x_W} \right) (y_n - y_s) = b_P (y_n - y_s) (x_e - x_w).$$

Die diffusiven Terme werden, entsprechend den positiven Geschwindigkeiten, mit dem UDS approximiert. Die Koeffizienten für ein äquidistantes Rechengitter mit den Rechengitterweiten Δx und Δy lauten:

$$a_N = \frac{D}{\Delta y^2}, \quad a_E = \frac{D}{\Delta x^2}, \quad a_S = \frac{\rho u_y}{\Delta y} + \frac{D}{\Delta y^2}, \quad a_W = \frac{\rho u_x}{\Delta x} + \frac{D}{\Delta x^2}, \quad \text{und} \\ a_P = \frac{\rho u_x}{\Delta x} + \frac{2D}{\Delta x^2} + \frac{\rho u_y}{\Delta y} + \frac{2D}{\Delta y^2}.$$

Beschreibung für transienten Problemstellungen findet sich z. B. bei Schwarze [113]. Für ein zweidimensionales Rechenggebiet mit $i = N, j = M$ kartesischen KV erhält man:

$$a_P^{i,j} \varphi_P^{i,j} - \sum_c a_c^{i,j} \varphi_c^{i,j} = b_P^{i,j}. \quad (5.30)$$

Dies gilt für alle $i = 1, \dots, N$ und $j = 1, \dots, M$ mit den unbekannten Knotenwerte $\varphi_P^{i,j}$ in den Mittelpunkten der Kontrollvolumen. Die Koeffizienten a_E, a_W, a_N, a_S und a_P werden aus den Quotienten der Diffusionskoeffizienten und der Rechengitterweite gebildet. Das zu lösende Gleichungssystem besitzt gemäß [114] folgende Gestalt:

$$\begin{bmatrix} a_P^{1,1} & -a_N^{1,1} & \cdots & 0 & \cdots & -a_E^{1,1} & & & \\ -a_S^{1,2} & \ddots & \ddots & & & \ddots & & 0 & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots & & \ddots & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \ddots & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & -a_E^{N-1,M} \\ -a_W^{2,1} & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & -a_N^{N,M-1} \\ & & & & -a_W^{N,M} & \cdots & 0 & \cdots & -a_S^{N,M} \\ & & & & & & & & a_P^{N,M} \end{bmatrix} \quad (5.31)$$

In Matrixschreibweise wird dieser Ausdruck mit $A\varphi = b$ abgekürzt. Im nicht-kartesischen Fall können zusätzliche Koeffizienten auf den Nebendiagonalen auftreten. Die aus den Diskretisierungsverfahren resultierenden Matrizen A sind nach der Berücksichtigung der Randbedingungen in der Regel nicht-singulär, d. h. invertierbar, so dass die Gleichungssysteme eindeutig lösbar sind. Im Allgemeinen wird zwischen direkten und iterativen Ansätzen zur numerischen Lösung dieser Systeme unterschieden. Charakteristisch für direkte Methoden ist, dass die exakte Lösung des Gleichungssystems durch einmalige Anwendung eines Algorithmus erhalten wird, während bei iterativen Methoden eine approximative Lösung des Gleichungssystems durch mehrmalige Anwendung einer Iterationsvorschrift sukzessive erreicht wird.

5.3 Numerisches Gesamtverfahren

Das resultierende algebraische System der linearisierten Erhaltungs- und Transportgleichungen wird mit den frei verfügbaren Software-Tools *HYPRE*¹ und *SPARSKIT*² gelöst. Zur Lösung der kleineren linearen Systeme, wie dem DQMoM-System und den Eigenwertproblemen im Rahmen des PD-Algorithmus, werden Methoden aus der ebenfalls frei verfügbaren Software *LAPACK*³ angewendet. Eine Übersicht über die Methoden der numerischen linearen Algebra ist z. B. in [135] zu finden. *HYPRE* repräsentiert hierbei eine Bibliothek linearer Löser für großskalige wissenschaftliche Problemstellungen für parallele Multi-Grid-Methoden mit strukturierten und unstrukturierten Rechengittern und unterstützt eine Vielzahl der gängigen Programmiersprachen. *SPARSKIT* wiederum beinhaltet eine Bibliothek mit Routinen für die Berechnung von dünn besetzten Matrizen. Hierzu zählen z. B. iterative Löser und Routinen zur Vorkonditionierung der Matrizen, sowie Routinen für grundlegende Matrizenoperationen. *Sparskit* ist in der Programmiersprache *FORTRAN* geschrieben. Die Software *LAPACK* ist ebenfalls in der Programmiersprache *FORTRAN* geschrieben und umfasst Routinen zur Lösung paralleler, linearer Gleichungssysteme. Hierzu zählen zum Beispiel Lösungsverfahren für Eigenwertprobleme, Routinen für die Matrizen-Faktorisierung wie das LU-, oder das QR-Verfahren, sowie die Cholesky-Zerlegung für dicht besetzte und diagonal-dominante Matrizen. Im Rahmen der DQbSMoM finden die, auf einer Matrizenzerlegung basierenden, Routinen »DSGESV« und »DGESV« Anwendung. Die Routine »DSTEQR« verwendet implizite QL- und QR-Methoden zur Lösung von Eigenwertproblemen, um die Eigenwerte und Eigenvektoren einer symmetrischen, tridiagonalen Matrix zu berechnen.

5.3.1 Erhaltung der Masse

Ein numerisches Berechnungsverfahren ist dann als konservativ zu bezeichnen, wenn die Erhaltungseigenschaften der Differentialgleichung unabhängig von der Wahl der Diskretisierungsverfahren für das Problemgebiet wiedergegeben werden. Aus den Erhaltungsprinzipien ergeben sich darüber hinausgehend physikalische Grenzen, innerhalb derer die Lösung liegen muss. Zu den physikalischen Grenzen zählen z. B., dass die Dichte der kontinuierlichen und dispersen Phase, oder die turbulente kinetische Energie stets positiv sein müssen, skalare Größen, wie die Konzentration einer Spezies, müssen zwischen null und eins liegen. Eine Forderung an ein numerisches Lösungsverfahren liegt daher in der Forderung nach Beschränktheit des Verfahrens.

Die Erhaltung der Masse sowohl der kontinuierlichen, als auch der dispersen Phase wird hierbei sichergestellt durch die sog. Kontinuitätsgleichung, wie sie im Rahmen der Modellierung mehrphasiger Fluide, Gleichung 2.62 in Kap. 2, gezeigt wird. Grundlage der Berechnung des Massenflusses der kontinuierlichen Phase \dot{m}_c , und somit der Massenerhaltung, ist die Dichte der dispersen Phase ρ_d . Obwohl die Dichte des flüssigen Brennstoffs ρ_d als konstant betrachtet wird, ist diese Annahme für die effektive Viskosität, $\rho_{d,eff} = \rho_d \alpha_d$, nicht zutreffend. Demnach ist die Divergenz des Geschwindigkeitsvektors nicht vernachlässigbar und der konvektive Term von Gl. (2.62) wird entsprechend Gl. (5.32) in zwei Teile aufgesplittet:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_d \alpha_d u_{i,d}) = \underbrace{\rho_d u_{i,d} \frac{\partial \alpha_d}{\partial x_i}}_{\text{Konvektion}} + \underbrace{\rho_d \alpha_d \frac{\partial u_{i,d}}{\partial x_i}}_{\text{Divergenz}}. \quad (5.32)$$

Der erste Term auf der rechten Seite von Gl. (5.32) ist äquivalent zu einem konvektiven Term einer skalaren Transportgleichung von α_d für inkompressible Strömungen, der zweite Term berücksichtigt die Divergenz

¹ http://computation.llnl.gov/casc/linear_solvers/

² <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/SPARSKIT/>

³ <http://www.netlib.org/lapack/>

des Geschwindigkeitsvektors und dient der Gewährleistung der Massenerhaltung. Der konvektive Term wird mithilfe der in Abschnitt 5.1.2 vorgestellten Methoden approximiert, die Divergenz hingegen wird explizit wie ein zusätzlicher Quellterm behandelt. Groll hat in seiner Dissertation gezeigt, dass bei Anwendung dieser Vorgehensweise die Massenerhaltung und die Konservativität des Gesamtverfahrens garantiert ist.

Darüber hinausgehend wird für die kontinuierliche Phase nicht direkt eine Erhaltungsgleichung gelöst, stattdessen wird für jede betrachtete disperse Phase d eine Transportgleichung des Volumenanteils α_d gelöst und der Volumenanteil der umgebenden Gasphase wird mittels:

$$\alpha_g = 1 - \sum_{d=1}^{N-1} \alpha_d \quad (5.33)$$

bestimmt. N gibt in obiger Gleichung die Anzahl an betrachteten dispersen Phasen innerhalb der zu lösenden Problemstellung an. Darüber hinausgehend ist ein positiver Wert für α_d durch Anwendung des UDS, siehe Abschnitt. 5.1.2, für die Diskretisierung des konvektiven Terms sichergestellt.

5.3.2 Druckkorrekturverfahren

Bei der Umsetzung des numerischen Gesamtverfahrens gibt es insgesamt $N(1 + n_{\text{dim}})$ Variablen, die mit N Erhaltungsgleichungen und $N \cdot n_{\text{dim}}$ Impulserhaltungsgleichung gelöst werden; N gibt hierbei die Anzahl an Phasen in einem System an, und n_{dim} die mathematische Dimension des Rechengebiets. Die Impulsgleichungen beinhalten sowohl die phasenbezogenen Geschwindigkeiten, als auch den Druck als zu lösende Strömungsgröße. Die Kontinuitätsgleichung weist hingegen lediglich die Geschwindigkeiten auf – somit fehlt eine unabhängige Gleichung zur Lösung des Drucks. Das resultierende System der gekoppelten Gleichungen ist dünn besetzt und somit als »schlecht« konditioniert zu bezeichnen. Im Rahmen des sog. Druckkorrekturverfahrens werden die Gleichungen unter Annahme eines Schätzwerts für den Druck mit anschließender iterativer Lösung, bis eine hinreichend genaue Lösung vorliegt, sequentiell gelöst.

Zur Lösung wird die im Folgenden beschriebene *Semi-implicit Method for Pressure Linked Equations* (SIMPLE)-Verfahren verwendet. Über den SIMPLE-Algorithmus wird das Geschwindigkeitsfeld durch eine Korrektur des Druckfeldes entsprechend angepasst, so dass die Massenerhaltung im gesamten Lösungsgebiet erfüllt ist. Dieser Prozess erfolgt nach jeder äußeren Iteration, bis zum Unterschreiten eines benutzerdefinierten Grenzwerts. Formal lässt sich die Druckkorrekturgleichung mithilfe der Aufteilung des Drucks in einen Schätzwert p^* und einen Korrekturwert p' , bzw. der Geschwindigkeit \mathbf{u}^* und \mathbf{u}' entsprechend Gl. (5.34) beschreiben:

$$p = p^* + p' \quad \text{und} \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \mathbf{u}'. \quad (5.34)$$

Anschließend wird eine Impulserhaltungsgleichung mit dem summierten Druck p aufgestellt, von der wiederum die Impulserhaltungsgleichung unter Berücksichtigung der realen Geschwindigkeit \mathbf{u} und die des Druckparameters p^* abgezogen wird. Diese Vorgehensweise führt zu einer Gleichung, die ausschließlich von den Korrekturwerten p'' und \mathbf{u}'' abhängt und eine »Druck-Geschwindigkeits-Kopplung« darstellt. Hiermit wird wiederum die Kontinuitätsgleichung aufgestellt, wobei die Kenntnis der Druckkorrekturwerte wiederum zur Bestimmung der Geschwindigkeitskorrektur führt. Druckkorrekturverfahren stellen iterative Prozesse dar und basieren auf der Verwendung von Werten vorangegangener Iterationen $i - 1$ als Schätzwerte der nachfolgenden Iteration $i + 1$. Nachfolgende Schritte werden zur Bestimmung des Druckfeldes p^{i+1} und des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u}^{i+1} für die Iteration $i + 1$ angewendet:

1. Lösen der Impulsgleichung mit einem geschätzten Druckfeld p^* und einem Geschwindigkeitsfeld \mathbf{u}^* ;

2. Einsetzen des berechneten Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{u}^* in die Kontinuitätsgleichung zur Bestimmung der »Massenquelle« innerhalb der Kontinuitätsgleichung;
3. Definition der Korrekturen $p' = p^{k+1} - p^*$ und $\mathbf{u}' = \mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^*$;
4. Herstellung eines Zusammenhangs zwischen p' und \mathbf{u}' mit dem geschätzten Druckfeld, der Gleichung für die Massenquelle und den Impulsgleichungen;
5. Einsetzen in Massenquelle in die Gleichung von p' ;
6. Bestimmung von u' mit den bereits bekannten Größen des Druckkorrekturverfahrens;
7. Berechnung der angenäherten Größen u^{k+1} und p^{k+1} .

Abweichend von der Lösung einphasiger Systeme ist im vorliegenden Fall der Einfluss der dispersen Phase über den Volumenanteil auf das Druckkorrekturverfahren zu berücksichtigen, da die Divergenz der Multi-Fluid-Methode nicht null entspricht. Zuerst erfolgt eine Lösung der Transportgleichungen der Volumenanteile der dispersen Phase α_d , danach entsprechend Gl. (5.33) der Volumenanteil der kontinuierlichen Phase, im Anschluss werden die Impulserhaltungsgleichungen aus Kap. 2 für beide Phasen gelöst. Die Erhaltungsgleichungen der Masse und des Impulses innerhalb der dispersen Phase sind somit erfüllt, die der kontinuierlichen Phase jedoch noch nicht. Mithilfe einer Abschätzung des Druckfelds auf dem Rechengitter können die Geschwindigkeitskomponenten der Impulserhaltungsgleichungen für die kontinuierliche Phase bestimmt werden. In den ersten Schritten des Druckkorrekturverfahrens sind Abweichungen in der Kontinuitätsgleichung zu erwarten, daher werden der Druck und die Geschwindigkeitskomponenten unter Anwendung eines Korrekturfaktors erneut berechnet, bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist und das Druckkorrekturverfahren innerhalb des zugrundeliegenden Zeitschritts abgeschlossen werden kann.

Weitere ungeschlossene Terme der Druckkorrekturgleichungen werden im Rahmen des beschriebenen SIMPLE-Verfahrens vernachlässigt. Das SIMPLE-Verfahren ist insbesondere für unstrukturierte, nicht-orthogonale Rechengitter geeignet und lässt sich bis zu einer Machzahl $Ma < 0,5$ anwenden [32]. Weiterführende Informationen zu den Druckkorrektur-Verfahren sind bei [32, 114] zu finden.

5.3.3 Operator-splitting-Verfahren

Wie in Kap. 5.3.3 aufgeführt, werden die auftretenden physikalischen Phänomene, die in Gl. 3.5 aufgeführt sind, separat voneinander betrachtet. Splitting-Verfahren werden u. A. zur Beschleunigung von Simulationen angewendet, wenn mehrere physikalische Phänomene zu beachten sind, oder die Phänomene auf unterschiedlichen Zeitskalen stattfinden. Zur Einführung des *operator-splitting*-Ansatzes sei die *fractional-step*-Methode für eine Differentialgleichung 5.3.3 mit einem transienten und einem konvektiven Term, sowie der rechten Seite $g(\phi)$ in Abhängigkeit eines charakteristischen Größenmaßes ϕ aufgeführt:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (f(\phi)) = g(\phi). \quad (5.35)$$

Die Anwendung einer *fractional-step*-Methode auf Gl. erlaubt eine Aufspaltung von Gl. (5.3.3) in zwei Gleichungen am transienten Term:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (f(\phi)) = 0, \quad (5.36)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = g(\phi). \quad (5.37)$$

Eine Lösung von Gl. 5.3.3 wird im Anschluss durch alternierendes Lösen von Gleichung (5.36) und (5.37) erreicht. Die beschriebene Methode ist insbesondere für die Anwendung in Differentialgleichungen mit vielen beeinflussenden Termen vorteilhaft, da der Grad der Komplexität, bzw. der Abhängigkeit der Variablen zueinander reduziert werden kann. Darüber hinausgehend besteht bei Anwendung der *fractional-step*-Methode die Möglichkeit, die auftretenden physikalischen Phänomene mit Modellen auf unterschiedlichen Hierarchieebenen – und den dazugehörigen Lösungsmechanismen – zu verwenden. Bedingt durch die Verwendung unterschiedlicher Lösungsmechanismen kann ggf. auch die Stabilität des gesamten Lösungsverfahrens verbessert werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird der *operator-splitting*-Ansatz zur separaten Behandlung der Modellierung der Koaleszens, sowie der Wärme- und Massentransfermechanismen im Rahmen des EMSM-Algorithmus genutzt. Kah schlägt die Berücksichtigung von zwei kombinierten Splitting-Strategien – dem Lie-Splitting und dem Strang-Splitting – vor. Zur vorhergehenden Fehlerabschätzung von Splitting-Verfahren sei nach Geiser u. Elbiomy eine Differentialgleichung folgender Form betrachtet:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L_1(\phi) + L_2(\phi), \quad (5.38)$$

wobei L_1 und L_2 Differentialoperatoren darstellen. Eine Lösung des Anfangswertproblems unter Annahme der Vereinfachung $\phi(t = 0) = \phi_0$ ist gegeben durch:

$$\phi(t) = e^{(L_1+L_2)t} \phi_0. \quad (5.39)$$

Sofern L_1 und L_2 vertauschbar sind, führt eine Anwendung der Rechenregeln für Exponentialfunktionen auf:

$$\phi(t) = e^{L_1 t} e^{L_2 t} \phi_0. \quad (5.40)$$

Sofern, wie im vorliegenden Fall, die Vertauschbarkeit nicht gegeben ist, kann mithilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Formulierung zulasten eines Fehlers erster Ordnung eine Lösung wie folgt approximiert werden:

$$e^{(L_1+L_2)t} \phi_0 = e^{L_1 t} e^{L_2 t} \phi_0 + O(t). \quad (5.41)$$

Mit der beschriebenen Methode ist es möglich, ein numerisches Verfahren durch abwechselnde Behandlung von L_1 und L_2 zu lösen. Der Ansatz des Lie-Splittings [66] beruht auf der in Gl. (5.41) angeführten sequentiellen Lösung von Gl. (5.36) und (5.37):

1. Lösen von Gl. (5.36) während des Zeitschritts Δt ;
2. Lösen von Gl. (5.37) während des Zeitschritts Δt .

Das Lie-Splitting stellt hierbei einen vergleichsweise einfachen Ansatz dar und weist einen Fehler erster Ordnung auf [36]. Eine Splitting-Strategie mit einem Fehler zweiter Ordnung ist durch das Strang-Splitting [66, 78, 128] entsprechend folgender Berechnungsvorschrift gegeben:

1. Lösen von Gl. (5.36) während des Zeitschritts $\Delta t/2$;
2. Lösen von Gl. (5.37) während des Zeitschritts Δt ;
3. Lösen von Gl. (5.36) während des Zeitschritts $\Delta t/2$.

Entsprechend der Zeitschrittweite Δt lässt sich der Strang-Splitting-Ansatz durch Betrachtung zweier Lie-Splitting konstruieren; im geraden Zeitschritt $2\Delta t$ folgt der Algorithmus:

1. Lösen von Gl. (5.36) während des Zeitschritts Δt ;

2. Lösen von Gl. (5.37) während des Zeitschritts Δt ,
sowie in der inversen Reihenfolge für den ungeraden Zeitschritt $2\Delta t + 1$:

1. Lösen von Gl. (5.37) während des Zeitschritts Δt ;
2. Lösen von Gl. (5.36) während des Zeitschritts Δt .

Obiger Ausdruck wiederum ist äquivalent zu einem Strang-Splitting über die Zeitschrittweite $2\Delta t$ ist

1. Lösen von Gl. (5.36) während des Zeitschritts Δt ;
2. Lösen von Gl. (5.37) während des Zeitschritts $2\Delta t$;
3. Lösen von Gl. (5.36) während des Zeitschritts Δt .

Detailliertere Informationen des im Rahmen dieser Arbeit gewählten Splitting-Ansatzes, sowie dessen Anwendung finden sich u. A. in [66, 78].

6 Verifizierung und Validierung

Das folgende Kapitel stellt die numerischen Resultate der entwickelten Kopplung zwischen der DQbSMoM und dem FGM-Modell dar. Basierend auf den vielversprechenden numerischen Resultaten der nicht-reaktiven Testfälle SP1, SP2, SP3 und SP6, bei denen der Fokus auf der Modellierung der Massen- und Wärmetransferprozesse liegt, werden in dieser Arbeit die drei reaktiven Konfigurationen, ebenfalls mit Aceton als Brennstoff, vorgestellt. Der experimentelle Aufbau der zugrundeliegenden Konfiguration wird in Kap. 6.1 vorgestellt. In diesem Abschnitt werden die Erzeugung des Sprays, die eingesetzten Messmethoden, sowie die betrachteten Konfigurationen diskutiert. Die numerische Umsetzung des Experiments, das verwendete Rechengitter, die angewendeten Randbedingungen, sowie die Konditionierung der DQbSMoM und des *fgm*-Modells werden in Kap. 6.2 vorgestellt. Abschnitt 6.3 beinhaltet die numerischen Resultate der reaktiven Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3 im Vergleich mit den experimentellen Resultaten. Den Abschluss des Kapitels bildet Abschnitt 6.4 mit der Schlussfolgerung und Bewertung der durchgeführten Simulationen.

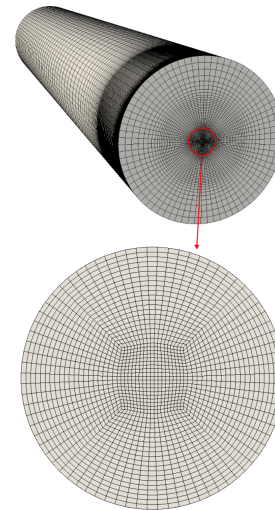
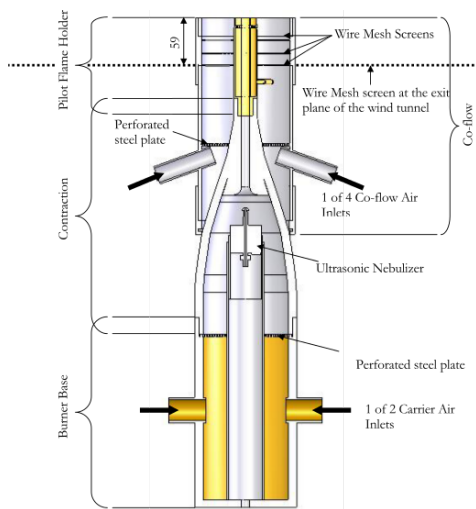
Zur numerischen Simulation von Sprays stehen derzeit u. A. folgende drei experimentelle Konfigurationen zur Verfügung:

- *Cambridge University Swirling Spray Burner*,
- *CORIA Rouen Spray Burner*,
- *Sydney University Spray Burner*.

Der *Sydney University spray burner* stellt hierbei sowohl für die nicht-reaktiven, als auch für die reaktiven Konfigurationen eine Zielkonfiguration des *Turbulent Combustion of Sprays* (TCS)-Arbeitskreises dar und bietet deshalb durch die Mitarbeit unterschiedlichster Forschungsgruppen eine umfangreiche Datenbasis. Darüber hinausgehend wurden bereits in vorangegangenen Publikationen eine Auswahl der nicht-reaktiven Konfigurationen diskutiert, siehe [130, 131].

6.1 Experimenteller Aufbau

Der von Gounder vorgestellte, experimentelle Aufbau stellt einen pilotierte Jet-Brenner in einem *Coflow* dar (siehe Abb. 6.1a). Die Düse des Jets weist einem Durchmesser von $D_{\text{Jet}} = 10,5 \text{ mm}$ auf, der innere Durchmesser des Pilots an der Austrittsebene beträgt $D_{\text{pilot}} = 25 \text{ mm}$, und der Durchmesser des *Coflow* $D_{\text{Coflow}} = 104 \text{ mm}$. Die Materialstärke der Lippe zwischen der Düse des Jets und der des Piloten, sowie zwischen der des Piloten und der des Coflows beträgt $0,2 \text{ mm}$. Der Aufbau mit der Brennerbasis, der Brennstoff-, sowie Trägerluftzufuhr ist in einem Windtunnel installiert, der Windtunnel weist hierbei einen Querschnitt von $290 \times 290 \text{ mm}^2$ auf. Die Tropfen werden in einem Breitband-Ultraschall-Zerstäuber – dieser ist konzentrisch im Windtunnel angeordnet – mittels mechanischer Schwingungen piezokeramischer Elemente im Megahertz-Bereich, die auf einen Flüssigkeitsfilm übertragen werden, erzeugt. Die erzeugten Schwingungen führen an der Oberfläche des Flüssigkeitsfilms zur Ausbildung von Kapillarwellen, deren Amplitude mit steigender Anregungsfrequenz exponentiell ansteigt. Erreicht die Frequenz einen kritischen Wert, bilden sich Tropfen eines definierten Durchmessers aus. Der Tropfendurchmesser nimmt hierbei mit steigender Anregungsfrequenz ab. Als weitere Einflussfaktoren auf den Tropfendurchmesser, sowie die Tropfengrößenverteilung, ist die Dichte und die Oberflächenspannung des Flüssigkeitsfilms zu nennen. Der Breitband-Ultraschall-Zerstäuber ist 215 mm unterhalb des Austritts angebracht, die Tropfen werden mithilfe des Tragluftmassenstroms zum Brenneraustritt transportiert, wobei das Aceton bis zum



(a) Schnitt durch den experimentellen Aufbau des Sydney-Brenners von Gounder [47].

(b) Schematische Darstellung des verwendeten Rechengitters mit Detailansicht des Einlasses.

Abbildung 6.1: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus des Sydney-Brenners mit den verwendeten Bezeichnungen (a); Darstellung des verwendeten Rechengitters mit Fokus auf dem Einlass an der ersten Messposition (b).

Brenneraustritt, bzw. bis zur ersten Messebene bei $x/D = 0,3$ bereits zum Teil verdampft ist (siehe hierzu Tabelle 6.1). Gounder verweist im weiteren darauf, dass im Rahmen der durchgeführten Experimente weder Hinweise auf Koaleszens, noch auf sekundären Tropfenzerfall festzustellen sind.

Für den Pilotbrenner wird in nicht-reaktiven Konfigurationen eine Geschwindigkeit von $u_{\text{pilot}} = 4,5 \text{ m/s}$ angenommen, für die reaktiven Konfigurationen hingegen wird ein Wert von $u_{\text{pilot}} = 11,9 \text{ m/s}$ gemessen. Die mittlere Austrittsgeschwindigkeit des *Coflow* liegt ebenfalls bei einem Wert von $u_{\text{Coflow}} = 4,5 \text{ m/s}$, die konfigurationsspezifische Geschwindigkeit des Jets ist Tabelle 6.1 zu entnehmen. Zur Strömungsberuhigung sind Lochbleche und wabenförmige Strukturen in den Pilotbrenner und den *Coflow* eingesetzt, die Turbulenzintensität I_t wird von Gounder mit ca. 5 % angegeben. Die Geschwindigkeits- und Tropfengrößenverteilung wird an sieben Messpositionen stromab der Brennermündung, beginnend bei 3,15 mm bis 315 mm, bzw. $x/D = 0,3$ bis $x/D = 30,0$, mithilfe der Laser-Doppler-Partikel-Anemometrie und der Laser-Doppler-Velocimetrie gemessen. Am Brenneraustritt liegt Gounder eine vollständig entwickelte Rohrströmung mit annähernd logarithmischer Normalverteilung der betrachteten Tropfendurchmesser vor. Mit diesen Konfigurationen wird eine gleichmäßige und stetige Geschwindigkeitsverteilung am Austritt ermöglicht.

Laser-Doppler-Partikel-Anemometrie – Die Laser-Doppler-Anemometrie ist ein berührungsloses optisches Messverfahren zur punktuellen Bestimmung von Geschwindigkeitskomponenten in Fluidströmungen. Hierbei wird ein Laserstrahl mithilfe eines Strahlteilers in zwei Strahlen aufgeteilt. Am Messpunkt kreuzen sich diese Strahlen wieder und es entsteht im Kreuzungsbereich ein Interferenzstreifenmuster. Ein Tropfen, der sich zusammen mit dem Fluid durch das Streifenmuster bewegt, generiert dabei in einem Photodetektor ein Streulichtsignal, dessen Frequenz proportional zur Geschwindigkeit, und senkrecht zu den Interferenzstreifen ist. Durch Kombination von drei Laser-Doppler-Systemen mit unterschiedlichen Laserwellenlängen können punktuell alle drei Strömungsgeschwindigkeitskomponenten erfasst werden.

Laser-Doppler-Velocimetrie – Die Laser-Doppler-Velocimetrie ist eine der am häufigsten benutzte Methoden, um berührungsfrei Geschwindigkeiten zu messen. Ein Laserstrahl wird unter Anwendung eines Strahlteilers in zwei Teilstrahlen gleicher Intensität aufgespalten. Diese beiden Laserstrahlen werden durch zusätzliche optische Komponenten aufbereitet und über justierbare Spiegel im Messabstand

zum Schnitt gebracht. Wenn sich zwei Laserstrahlen unter einem definierten Winkel schneiden, entsteht im Messvolumen ein Interferenzstreifenmuster. Ein Fotoempfänger wiederum detektiert dieses Streifenmuster, und ermittelt im zurückgestreuten Licht die Dopplerfrequenz, d. h. die durch die Tropfenbewegung verursachte Frequenzverschiebung.

Die Messungen des Geschwindigkeitsfelds der kontinuierlichen Phase werden im Vorfeld der durchgeführten Messungen mit einer Argon-Stickstoff-Mischung mit einer Jet-Geschwindigkeit von 24 m/s durchgeführt und anschließend mit dieser Geschwindigkeit normiert (siehe Abbildung 6.1a). Entsprechend der fallspezifischen Strömungsgeschwindigkeit wird anschließend das normierte Profil durch Multiplikation mit der konfigurationsspezifischen Geschwindigkeit skaliert. Die Messungen der Temperatur werden mithilfe eines R-Typ-Thermoelements an den Messpositionen $x/D = 10$, $x/D = 20$ und $x/D = 30$ an unterschiedlichen radialen Positionen innerhalb der Strömung vorgenommen. Der Kopfdurchmesser des Thermoelements beträgt hierbei $r = 0,5 \text{ mm}$. Gounder haben keine Strahlungskorrektur, und keine Korrektur hinsichtlich möglicher Benetzungseffekte durch Brennstofftropfen auf dem Thermoelement vorgenommen. Die Flammenfärbung zeigt, kein für Ruß charakteristisches, gelbes Leuchten – daher ist von keinem zusätzlichen Wärmeeintrag durch Strahlung auszugehen.

Es stehen zwei Datensets – Datenset A und B – zur Verfügung, wobei sich nachfolgende Resultate auf Datenset A beziehen. Die Konfigurationen weisen jeweils Variationen der injizierten Brennstoffmenge, sowie der eingebrachten Luftmenge in den Jet auf. Laut Gounder handelt es sich bei den Konfigurationen sowohl um nicht-vorgemischte, als auch um vorgemischte Verbrennungsregime. Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3 (siehe Tabelle 6.1) weisen jeweils einen nicht-vorgemischten Charakter auf. Die in Gl. (4.25) und Gl. (4.26) vorgestellten Kennzahlen der Sprayverbrennung wurden von Gounder [47] lediglich für die Konfigurationen AcF1, AcF4 und AcF7 bestimmt. Aufgrund des statistischen Charakters der DQBSMoM ist weder die real vorliegende Tropfenanzahl N , noch die dimensionslose Separation S ermittelbar, woraus wiederum folgt, dass diese Kennzahlen nur mit größeren Unsicherheiten ermittelbar sind und somit lediglich der globale Charakter der Resultate verglichen wird.

Tabelle 6.1: Übersicht der zur Beschreibung der Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3 notwendigen charakteristischen Größen [47].

		AcF1	AcF2	AcF3
Trägermasse	(—)	Luft	Luft	Luft
Hauptgeschwindigkeit des Jets	(m/s)	24	36	24
Reynoldszahl des Jets	(—)	24.417	32.131	20.730
Massenfluss der Luft	(g/min)	150	225	150
Massenstrom des flüssigen Brennstoffs	(g/min)	75	75	45
Globales Äquivalenzverhältnis Φ_{global}	(—)	4,7	3,2	2,9
Massenstrom des flüssigen Brennstoffs	(g/min)	$x/D = 0,3$ 18,0	$x/D = 0,3$ 23,9	$x/D = 0,3$ 15,9
Massenstrom des verdampften Brennstoffs	(g/min)	$x/D = 0,3$ 57,0	$x/D = 0,3$ 51,2	$x/D = 0,3$ 29,1
Äquivalenzverhältnis Φ_{exit}	(—)	$x/D = 0,3$ 3,6	$x/D = 0,3$ 2,2	$x/D = 0,3$ 1,8
Dichte des Sprays im Jet	(kg/m ³)	1,51	1,44	1,42
Dyn. Viskosität des Sprays im Jet	(kg/m·s)	1,52e-05	1,86e-05	1,82e-05

Ein direkter Vergleich von Konfiguration AcF1 und AcF3 zeigt, dass sich zwar die Hauptgeschwindigkeit mit 24 m/s , sowie der Massenfluss der Luft mit 150 g/min auf dem gleichen Niveau befinden, der Massenstrom des flüssigen Brennstoffs von AcF3 mit 45 g/min jedoch niedriger als der von AcF1 mit 75 g/min ist. Ein hoher Anteil des Acetons ist bei den drei betrachteten Konfigurationen an der ersten Messposition jedoch bereits vorverdampft. AcF2 weist bei einer gleich hohen Injektionsrate des Brennstoffs wie AcF1 einen höheren

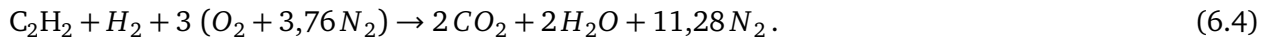
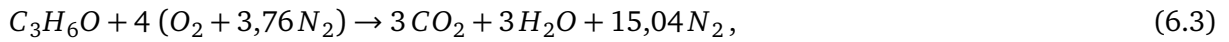
Massenfluss der Luft, und damit auch eine höhere Geschwindigkeit des Jets, auf. Die Bestimmung des Äquivalenzverhältnis Φ_{global} in Tabelle 6.1 erfolgt unter Anwendung nachfolgender Gleichung:

$$\Phi_{\text{global}} = \frac{\text{Luft/Brennstoff}|_{\text{st.}}}{\text{Luft/Brennstoff}|_{\text{global}}}, \text{ mit } \frac{\text{Luft}}{\text{Brennstoff}} \Big|_{\text{global}} = \frac{\text{Massenfluss der Luft}}{\text{Massenfluss des flüssigen Brennstoffs}}. \quad (6.1)$$

Der Zustand »overall« bezieht sich hierbei auf die initial eingebrachte Menge an Brennstoff und Luft, mit »stöich.« werden die, für eine stöchiometrische Umsetzung erforderlichen Massenflüsse bezeichnet. Das Äquivalenzverhältnis Φ_{exit} , ebenfalls in Tabelle 6.1 aufgeführt, entspricht:

$$\Phi_{\text{exit}} = \frac{\text{Luft/Brennstoff}|_{\text{st.}}}{\text{Luft/Brennstoff}|_{\text{exit}}}, \text{ mit } \frac{\text{Luft}}{\text{Brennstoff}} \Big|_{\text{exit}} = \frac{\text{Massenfluss der Luft}}{\text{Massenfluss des verdampften Brennstoffs}}. \quad (6.2)$$

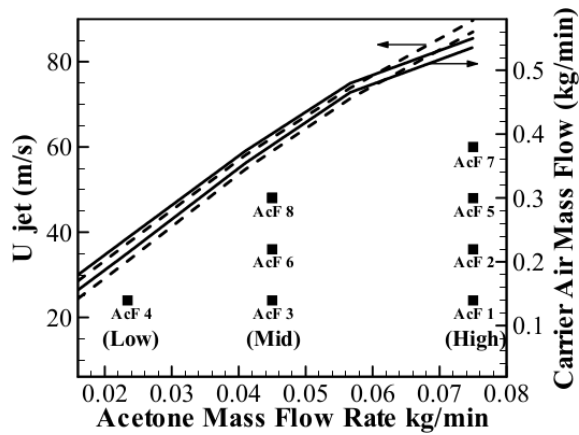
Die Umsatzreaktion des Jets mit Aceton und des Piloten, mit dem Brennstoff Acetylen und Wasserstoff, sind gegeben durch Gleichung (6.3) und (6.4):



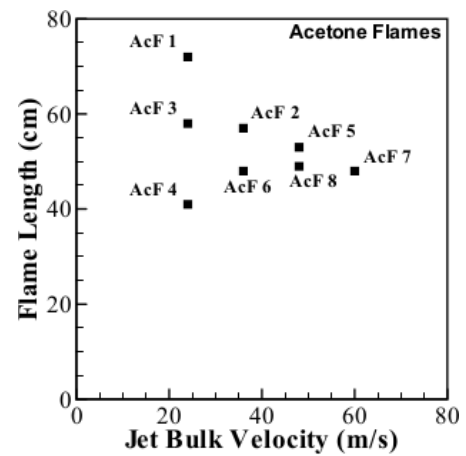
Die Zusammensetzung des Brennstoffs mit Acetylen und Wasserstoff des Pilotbrenners wurde hierbei so gewählt, dass ein gleiches Verhältnis von Kohlenstoff C zu Wasserstoff H wie bei der Umsatzreaktion von Aceton vorliegt. Das obere Flammbarkeitslimit von Aceton, d. h. das maximale Äquivalenzverhältnis liegt bei $\Phi_{\text{max}} = 2,85$, das untere Limit des Äquivalenzverhältnisses liegt bei $\Phi_{\text{min}} = 0,51$. Die ausgewählten Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3 weisen entsprechend Tabelle 6.1 ein Äquivalenzverhältnis von $\Phi_{\text{AcF1}} = 4,7 - 3,6$, $\Phi_{\text{AcF2}} = 3,2 - 2,2$, bzw. $\Phi_{\text{AcF3}} = 2,9 - 1,8$ auf. Eine Übersicht der reaktiven Konfigurationen mit dem Brennstoff Aceton ist Abb. 6.2 zu entnehmen. Die Einordnung der Konfigurationen erfolgt hinsichtlich der Geschwindigkeit des Jets, sowie des Massenflusses von Aceton und Luft. Darüber hinausgehend ist das experimentell bestimmte *Blow-Off*-Limit ebenfalls in Abb. 6.2a eingetragen. Die korrespondierende gemessene Flammenlänge der reaktiven Konfigurationen sind in Abb. 6.2b aufgeführt. Abb. 6.3 stellt die experimentell ausgewerteten, in der Datenbasis verfügbaren radialen Profile der Geschwindigkeit und der Geschwindigkeitsfluktuationen an der Messposition $x/D = 0,3$ der Konfiguration AcF2 dar. Der Austritt des Jets befindet sich im Bereich $0,0 \leq r/D < 0,5$, der des Piloten im Bereich $0,5 \leq r/D \leq 1,19$ und der des Coflows ab $r/D > 1,19$.

6.2 Numerischer Aufbau

Für die numerische Simulation des Sydney-Brenners wird ein dreidimensionales, blockstrukturiertes Rechengitter in Zylinderform mit annähernd 350.000 Kontrollvolumen verwendet, siehe hierzu Abbildung 6.1b. Der Zylinder hat einen Durchmesser von 100 mm – dies entspricht zehnmal dem Düsendurchmesser des Jets D_{jet} – und eine Länge von 500 mm, was ungefähr fünfzigmal dem Düsendurchmesser D_{jet} entspricht. Das Rechengitter weist im Bereich des Einlasses in axialer und radialer Richtung Verfeinerungen auf, die kleinste Seitenlänge eines KV beträgt 0,5 mm in jede Raumrichtung. Eine Rechengitterstudie wurde für die reaktive Konfiguration AcF3 mit einem feineren Rechengitter mit 800.000 Kontrollvolumen und einem größeren Rechengitter mit 150.000 Kontrollvolumen durchgeführt. Der umgebende Zylindermantel weist eine *slip-wall*-Randbedingung mit annähernd der gleichen Geschwindigkeit, wie die des *Coflow* auf. Die erste Messposition oberhalb des Brenneraustritts bei $x/D = 0,3$ bildet den numerischen Einlass. Die vorhandenen Messdaten in Tabelle 6.1 von Gounder [47] dienen als Einlassrandbedingung, der Massenanteil Y_{∞} des verdampften Brennstoffs wird anhand von Gleichung (6.8) ermittelt. Die Temperatur der kontinuierlichen und der dispersen Phase am Einlass des Jets beträgt $T_{\text{jet}} = 293,15 \text{ K}$, ein gleicher

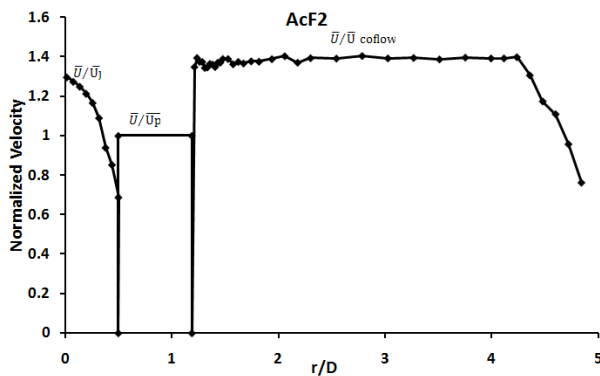


(a) Einordnung der reaktiven Konfigurationen bzgl. des Brennstoff- und Luftmassenflusses, sowie der Geschwindigkeit U_{jet} mit *Blow-Off-Limit* (durchgezogene und gestrichelte Linie).

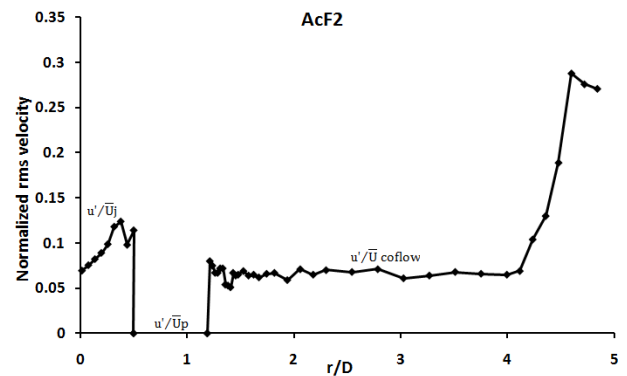


(b) Flammenlängen der reaktiven Konfigurationen AcF1 bis AcF8, aufgetragen über die Austrittsgeschwindigkeit des Jets.

Abbildung 6.2: Einordnung der reaktiven Konfigurationen (a) und Flammenlängen (b) der reaktiven Konfigurationen AcF1 bis AcF8 [47].



(a) Normiertes, radiales Geschwindigkeitsprofil der Konfiguration AcF2



(b) Normiertes Profil der Geschwindigkeitsfluktuationen der Konfiguration AcF2

Abbildung 6.3: Normiertes, radiales Geschwindigkeitsprofil (a) und normiertes, radiales Profil der Geschwindigkeitsfluktuationen (b) der Konfiguration AcF2 an der Messposition $x/D = 0,3$; der Austritt des Jets befindet sich im Bereich $0,0 \leq r/D \leq 0,5$, der Austritt des Piloten im Bereich $0,5 \leq r/D \leq 1,19$ und der Austritt des Coflows ab $1,19 \leq r/D$ [47].

Wert wird für den *Coflow* mit $T_{\text{Coflow}} = 293,15 \text{ K}$ angewendet. Die Temperatur der bereits brennenden Vormischflamme des Pilotbrenners beträgt hingegen $T_{\text{Pilot}} = 2256,15 \text{ K}$.

Für den Pilotbrenner wird im Rahmen der reaktiven Konfigurationen eine Geschwindigkeit der Gasphase von $u_{\text{Pilot}} = 11,9 \text{ m/s}$ angenommen. Die mittlere Austrittsgeschwindigkeit des *Coflow* erreicht einem Wert von $u_{\text{Coflow}} = 4,5 \text{ m/s}$, die konfigurationsspezifische Geschwindigkeit des Jets ist Tabelle 6.1 zu entnehmen. Die Turbulenzintensität I_t mit einem Wert von 5 % angegeben, eine Abschätzung für die turbulente kinetische Energie k und die Dissipation ε führt auf:

$$k = \frac{3}{2} \sqrt{u' u'} \quad , \text{ wobei } u' = I_t U \quad , \text{ und } I = 0,05 Re^{-1/8} \quad , \quad (6.5)$$

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{0,205 D_{\text{jet}}} \quad . \quad (6.6)$$

Diese Abschätzungen sind insbesondere in der Scherschicht zwischen Jet und Pilot für k , sowie in Randbereichen relevant für die Aussagekraft der numerischen Resultate und für die Stabilität des Berechnungsverfahrens.

Für die transienten Simulationen wird eine Zeitschrittweite Δt von $0,75 e-5 \text{ s}$ bis $1,5 e-5 \text{ s}$ gewählt. Zur Beschreibung des Transports im Phasen-Raum im Rahmen (Kapitel 3.2.4) werden für das EMSM-Modell fünf Subiterationen, d. h. $\Delta t/5$, berechnet. Die Verwendung von Subiteration dient hierbei u. A. der Berechnung einer, von der Zeitschrittweite unabhängigen, Lösung der Massen- und Wärmetransferprozesse. Im Rahmen der Simulation wird eine Zwei-Wege-Kopplung der Phasen berücksichtigt. Die Zündung des Gemischs erfolgt, nachdem sich das nicht-reaktives Strömungsfeld vollständig im gesamten Rechenggebiet ausgebildet hat, bei 10.000 Schritten. Insgesamt wurden jeweils ca. 45.000 Schritt bis zum Vorliegen einer stationären Lösung berechnet. Die tatsächlich berechnete Zeit liegt somit zwischen 0,5 s und 0,6 s bei einer Rechenzeit von ca. vier Wochen auf dem institutseigenen Cluster.

Die Verteilungsfunktion $f(\mathbf{x}, t, \phi)$ der Tropfengröße ist in drei Sektionen I_k mit jeweils zwei Quadraturpunkten unterteilt, $I_1 = [0, \dots, 2,0 e-5 \text{ m}]$, $I_2 = [2,0 e-5, \dots, 4,5 e-5 \text{ m}]$ und $I_3 = [4,5 e-5 \text{ m}, \dots, \infty)$. Die Momente erster, zweiter und dritter Ordnung der initialen Verteilungsfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$ werden mithilfe der experimentell ermittelten mittleren Durchmessern D_{10} , D_{20} und D_{30} bestimmt, dabei wird das Moment nullter Ordnung mit dem Wert $m_0 = 1$ angenommen. Die Approximation der kontinuierlichen Verteilungsfunktion erfolgt mithilfe der ME-Methode (Gleichung (3.100)) und hat die Form einer logarithmischen Normalverteilung. Die auf diese Weise approximierte Verteilungsfunktion wird in die eingangs erwähnten Sektionen unterteilt. Die DQMoM-Punkte jeder Sektion werden mit der PD-Algorithmus [16, 52] bestimmt. Die Gewichtungsfaktoren $w_{k,n}$ und die Abzissenwerte des Durchmessers $d_{k,n}$ werden dabei mit dem PD-Algorithmus so bestimmt, dass die gemessene Tropfenkonzentration und der gemessene disperse Volumenstrom möglichst akkurat wiedergegeben werden. Die Approximation der Veränderung des Massenanteils von verdampftem Brennstoff Y_∞ in der kontinuierlichen Phase sind nach Gumprich [52] wie folgt definiert:

$$m_{\text{mix}} = m_{\text{gas}} + m_{\text{vap}} = (1 - Y_\infty) m_{\text{mix}} + Y_\infty m_{\text{mix}} \quad , \text{ bzw. } m_{\text{mix}} = \frac{m_{\text{gas}}}{(1 - Y_\infty)} \approx \frac{\rho_g \alpha_g}{1 - Y_\infty} \delta V \quad . \quad (6.7)$$

Dabei bezeichnet m_{mix} das Gemisch, m_{gas} die Gasphase und m_{vap} den verdampften Brennstoff. Nach einem Zeitschritt Δt ergibt sich daher:

$$Y_\infty(t + \Delta t) = \frac{m_{\text{vap}}(t) + \Psi_{\text{flux}}}{m_{\text{gas}}(t) + m_{\text{vap}}(t) + \Psi_{\text{flux}}} = \frac{Y_\infty(t) \rho_g \alpha_g(t) / (1 - Y_\infty(t)) + \Psi_{\text{flux}}}{\rho_g \alpha_g / (1 - Y_\infty(t)) + \Psi_{\text{flux}}} \quad . \quad (6.8)$$

Die Größe Ψ_{flux} bezeichnet die, während eines Zeitschritts Δt entstehende, Masse an verdampftem Brennstoff. Die Beschreibung der Massen- und Wärmetransferprozesse wird mit dem, auf dem Gleichgewichtsansatz basierenden, Modell von Abramzon-Sirignano vorgenommen. Obiger Ansatz (6.8) wird

ebenfalls für den Mischungsbruch Z im Rahmen der FGM-Modellierung angewendet. Die Bestimmung der Reaktionsfortschrittsvariablen c für das FGM-Modell unterscheidet sich für die vorgemischte und die nicht-vorgemischte Verbrennung in den Gewichtungsfaktoren von H_2O und CO , um die geforderte Stetigkeit vom unverbrannten in den verbrannten Bereich zu gewährleisten:

$$\text{Vorgemischte Verbrennung: } c = \frac{1}{2} \frac{Y_{H_2O}}{M_{H_2O}} + \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{1}{2} \frac{Y_{CO}}{M_{CO}}, \quad (6.9)$$

$$\text{Nicht-vorgemischte Verbrennung: } c = \frac{Y_{H_2O}}{M_{H_2O}} + \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}}. \quad (6.10)$$

Für eine vorgemischte Verbrennung findet Gleichung (6.9) – bestehend aus einer Linearkombination von H_2O , CO_2 und CO – Anwendung. Ist die Tabelle auf eine nicht-vorgemischte Verbrennung konditioniert, wird Gl. (6.10) zur Bestimmung der Reaktionsfortschrittsvariable angewendet. Im vorliegenden Fall wird jedoch auch der Pilotbrenner mit verbranntem Aceton als Brennstoff simuliert. Sollte Gl. (6.4) für den chemischen Umsatz im Pilotbrenner beachtet werden, wäre in diesem Fall die Einführung und die Berechnung von zwei Mischungsbruchgleichungen $Z_{C_3H_6O}$ und $Z_{C_2H_2+H_2}$, sowie von zwei Reaktionsfortschrittsvariablen $c_{C_3H_6O}$ und $c_{C_2H_2+H_2}$ vorzunehmen. Obige Gleichungen gelten daher bei Anwendung von Gleichung (6.3) für den chemischen Umsatz innerhalb des Jets und des Pilotbrenners.

Im Vorfeld der, in diesem Kapitel präsentierten, numerischen Resultate für die Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3 wurden eine Parameterstudie mit variierende numerische Randbedingungen anhand von Konfiguration AcF3 – diese Konfiguration zeichnet sich dadurch aus, dass sie bereits ab der untersten Messebene im brennbaren Bereich liegt – durchgeführt. Im Rahmen dieser Parameterstudie wurden u. A. Simulationen mit einer vorgemischten und nicht-vorgemischten Tabellierung simuliert und ausgewertet, um so die anzuwendende Tabellierungsstrategie festzulegen. In Abb. 6.4 ist ein Vergleich zwischen den numerischen Resultaten der vorgemischten und nicht-vorgemischten Tabellierungsstrategien, sowie den experimentellen Resultaten dargestellt. Auf dieser Basis wurden die Simulationen der Konfigurationen AcF1 und AcF2 mit einer nicht-vorgemischten Tabelle durchgeführt. Diese Annahme ist deckungsleich mit einer Auswertung der experimentellen Resultate durch Gounder [47] – die Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3 weisen einen nicht-vorgemischten Charakter auf. Die Tabellierung der nicht-vorgemischten Flammen basiert im Rahmen dieser Arbeit auf dem *GRI3.0*-Mechanismus für Aceton. Dieser Mechanismus beinhaltet 424 Reaktionen von insgesamt 80 Spezies. Der Einfluss der Verdampfung auf die Temperatur der umgebenden kontinuierlichen Phase, sowie die Bildung von Stickoxiden NO_x werden bei diesem Ansatz jedoch noch nicht berücksichtigt.

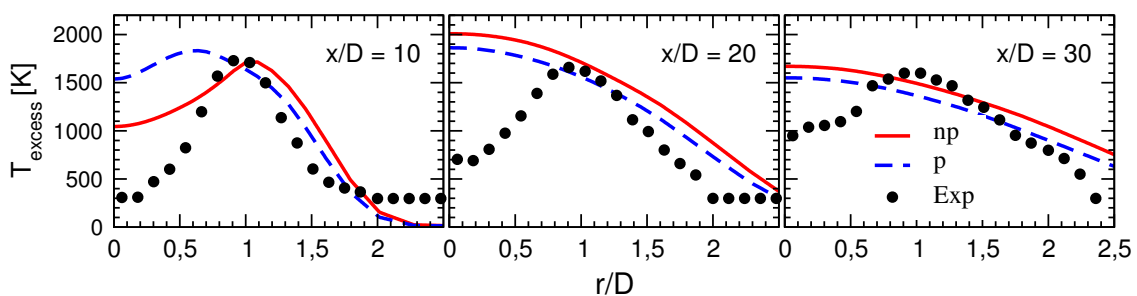


Abbildung 6.4: Darstellung der Temperatur T_{excess} an den Messpositionen $x/D = 10$, $x/D = 20$ und $x/D = 30$ der Konfiguration AcF2. Die rote Kurve zeigt den bisherigen Ansatz, die blaue Kurve den neuen Ansatz mit der dynamischen Subiteration und dem angepassten Momentenvektor, die schwarzen Punkte stellen die experimentellen Resultate dar.

6.3 Simulation

Dieses Kapitel beinhaltet die numerischen Resultate der Konfigurationen AcF1, AcF2 und AcF3. Die dem Verdampfungs- und dem Verbrennungsmodell zur Verfügung gestellten Stoffdaten von Aceton bei 1 atm und 300 K und sind bei Britton, Verein Deutscher Ingenieure et al. zu finden, siehe Tabelle 6.2.

Tabelle 6.2: Im Rahmen der Simulation verwendete, charakteristische Stoffdaten von Aceton [10, 137].

Stöchiometrische Mischung Z_{st} :	0,0955	Untere/obere Flammbarkeitsgrenze $Z_{\text{min}}/Z_{\text{max}}$:	0,051/0,230
Dichte ρ_d :	793,9 kg/m ³	Laminare Flammengeschwindigkeit s_L :	0,265 m/s
Siedetemperatur T_{boil} :	329,4 K	Kritische Temperatur T_{crit} :	508,3 K

Ein Vergleich mit den experimentellen Resultaten wird anhand der mittleren Durchmesser D_{10} , D_{20} , D_{30} und D_{32} , sowie der Tropfenkonzentration und dem Volumenstrom mit den zugrundeliegenden axialen und radialen Geschwindigkeiten U_{mean} und V_{mean} der dispersen Phase vorgenommen. Seitens der kontinuierlichen Phase werden darüber hinausgehend die numerischen Resultate der normierten Temperatur $T_{\text{excess}} = T_g - 293,15 \text{ K}$ präsentiert und an den Messpositionen $x/D = 10$, $x/D = 20$ und $x/D = 30$ mit den experimentellen Resultaten verglichen.

Auch wenn die gemessenen Flammenlängen von ca. 40 cm bis 80 cm erreichen (siehe Abb. 6.2), wurden die Temperaturen nur an diesen drei Messpositionen bestimmt.

6.4 Schlussfolgerung und Bewertung

Anhand der vorgestellten Resultate konnte der Nachweis erbracht werden, dass die Kopplung zwischen der DQbSMoM, dem Verdampfungs- und dem Verbrennungsmodell funktioniert. Insgesamt stellen die numerischen Resultate eine vielversprechende Basis für weiterführende Simulationen, bzw. Arbeiten dar.

Die Abweichungen bei den mittleren Durchmessern D_{10} , D_{20} und D_{30} , sowie bei dem Sauterdurchmesser D_{32} – Abb. 6.5, Abb. 6.6, Abb. 6.7 und Abb. 6.8, – im äußeren Bereich resultieren nach Meinung des Autors u. A. aus der Berechnungsvorschrift – sie werden mithilfe der Momente nullter, erster, zweiter und dritter Ordnung approximiert, siehe Gl. (3.9). Darüber hinausgehend besteht die Möglichkeit, dass die Dispersion des Jets überschätzt wird, was sich wiederum in den weiter stromab liegenden Messpositionen bemerkbar macht. Der stromabwärts zunehmende Tropfendurchmesser im Außenbereich des Jets wird zudem nicht getroffen, was tendentiell auf eine Unterschätzung der radialen Geschwindigkeitskomponente V_{mean} zurückzuführen ist. Das Auftreten dieser Abweichung zwischen experimentellen und numerischen Resultaten sollte in weiterführenden Simulationen unter Berücksichtigung der Koaleszens von Tropfen untersucht werden, auch wenn Gounder angibt, keinerlei Tropfenkoaleszens aufgezeichnet zu haben. In den Arbeiten von Sacomano Filho und Kadavelil sind vergleichbare Resultate zu finden.

Eine auf dem Volumenanteil der kontinuierlichen Phase basierende, korrigierte Darstellung der mittleren Durchmessern D_{10} , D_{20} und D_{30} , sowie des Sauterdurchmessers D_{32} ist Abb. 6.14, Abb. 6.15, Abb. 6.16 und Abb. 6.17 zu entnehmen. Die korrigierten numerischen Resultate sind mit einer gestrichelten blauen Linie dargestellt. Zur besseren Vergleichbarkeit sind die ursprünglichen Resultate, gekennzeichnet durch eine durchgezogene rote Linie, ebenfalls aufgetragen. Die genannten Abbildungen unterstützen die These, dass die turbulenzbedingte Dispersion der dispersen Phase stromabwärts des Brenneraustritts überschätzt wird, was wiederum zu einer stärkeren Aufweitung des Jets führt.

Zur Verifizierung dieser These könnte eine Parameterstudie mit einer Variation der Faktoren C_μ , $C_{\varepsilon 1}$ und $C_{\varepsilon 2}$ des k - ε -Modells für Anwendung in Sprays, sowie in reaktiven Umgebungsbedingungen durchgeführt werden (siehe Tabelle 2.1). Mit diesen Faktoren wird die Berechnung der turbulenten Größen k und ε

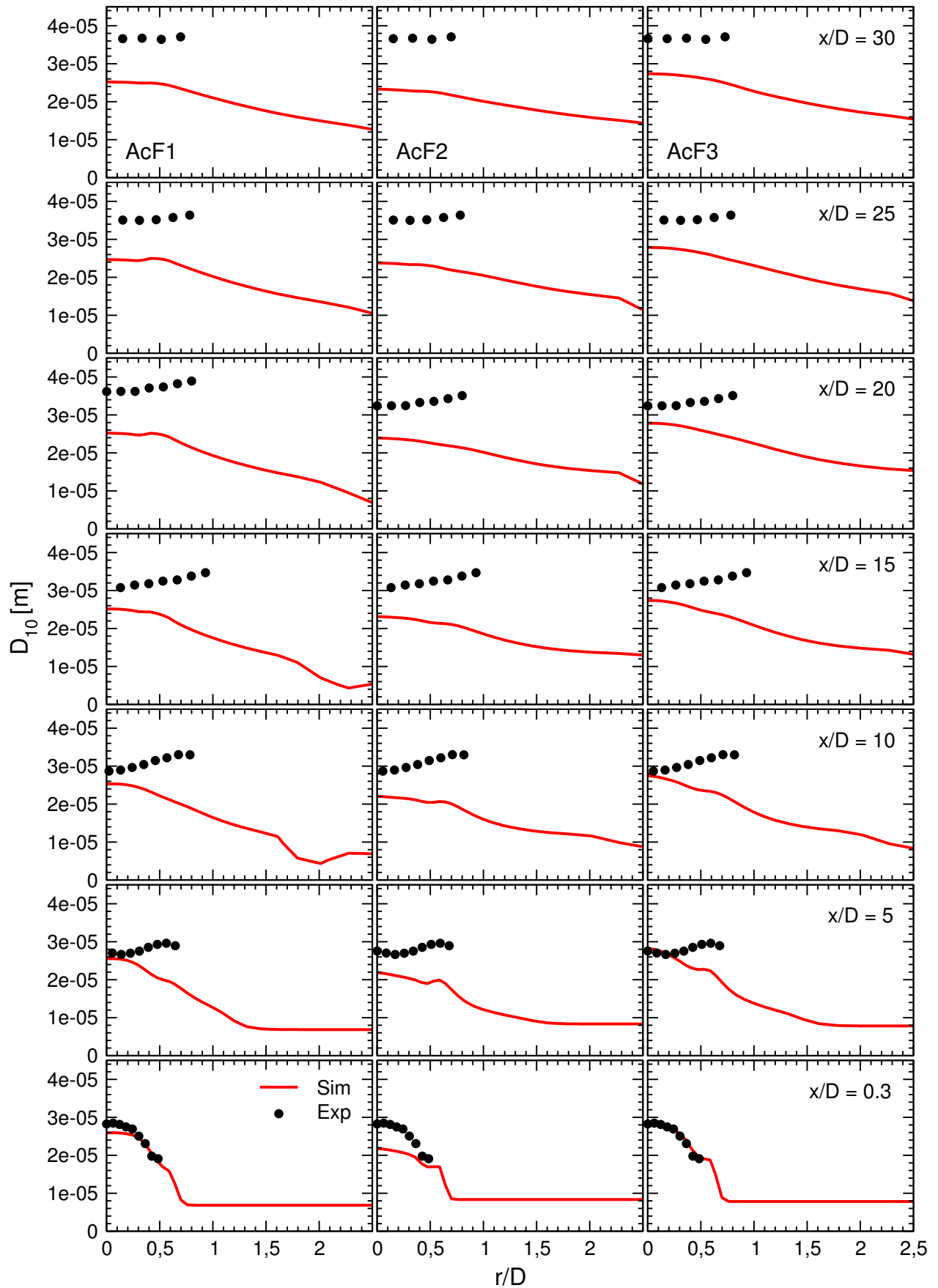


Abbildung 6.5: Radiale Profile des mittleren Durchmessers D_{10} an aufsteigenden Messpositionen stromab von $x/D = 0,3$ der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

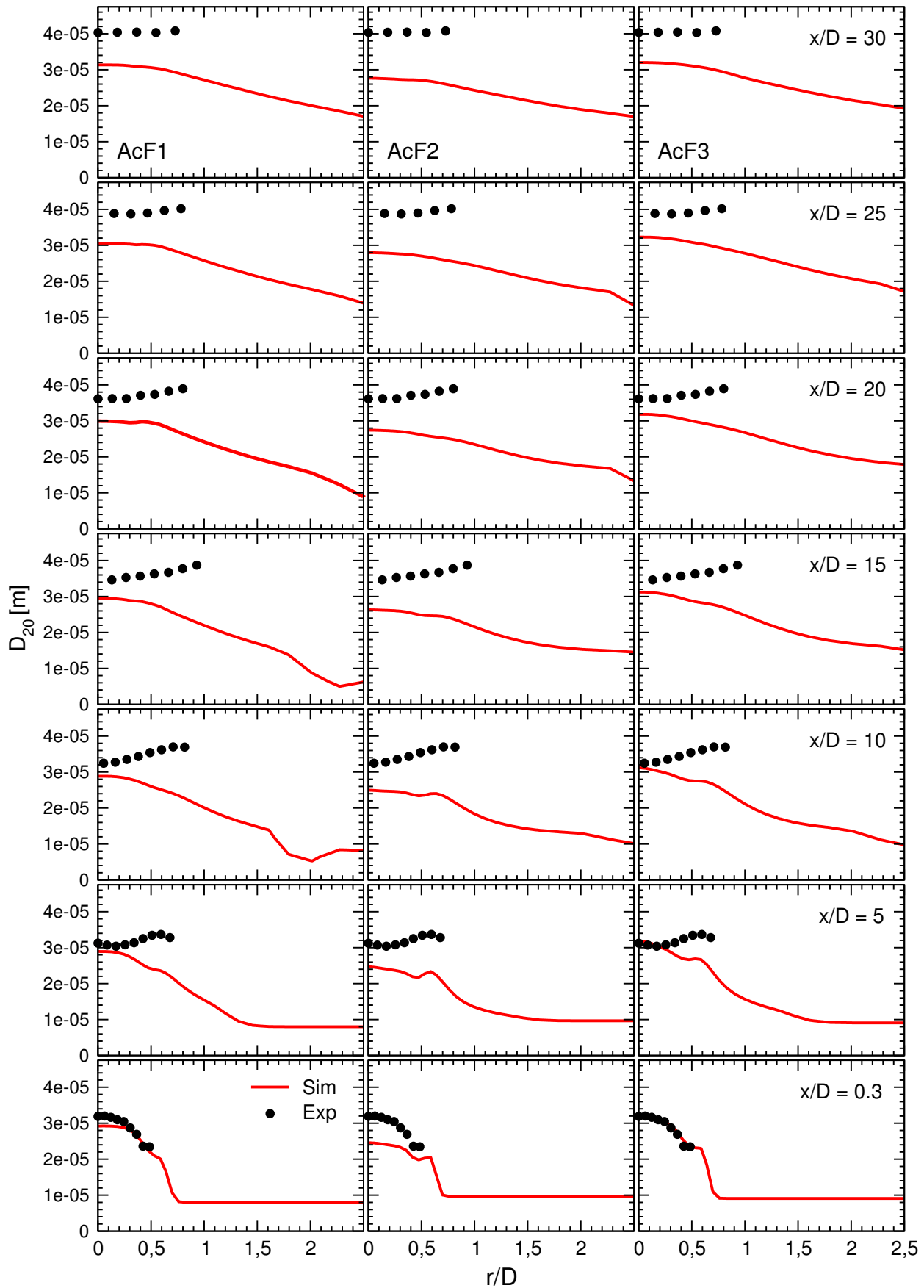


Abbildung 6.6: Radiale Profile des oberflächenabhängigen mittleren Durchmessers D_{20} an aufsteigenden Messpositionen der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

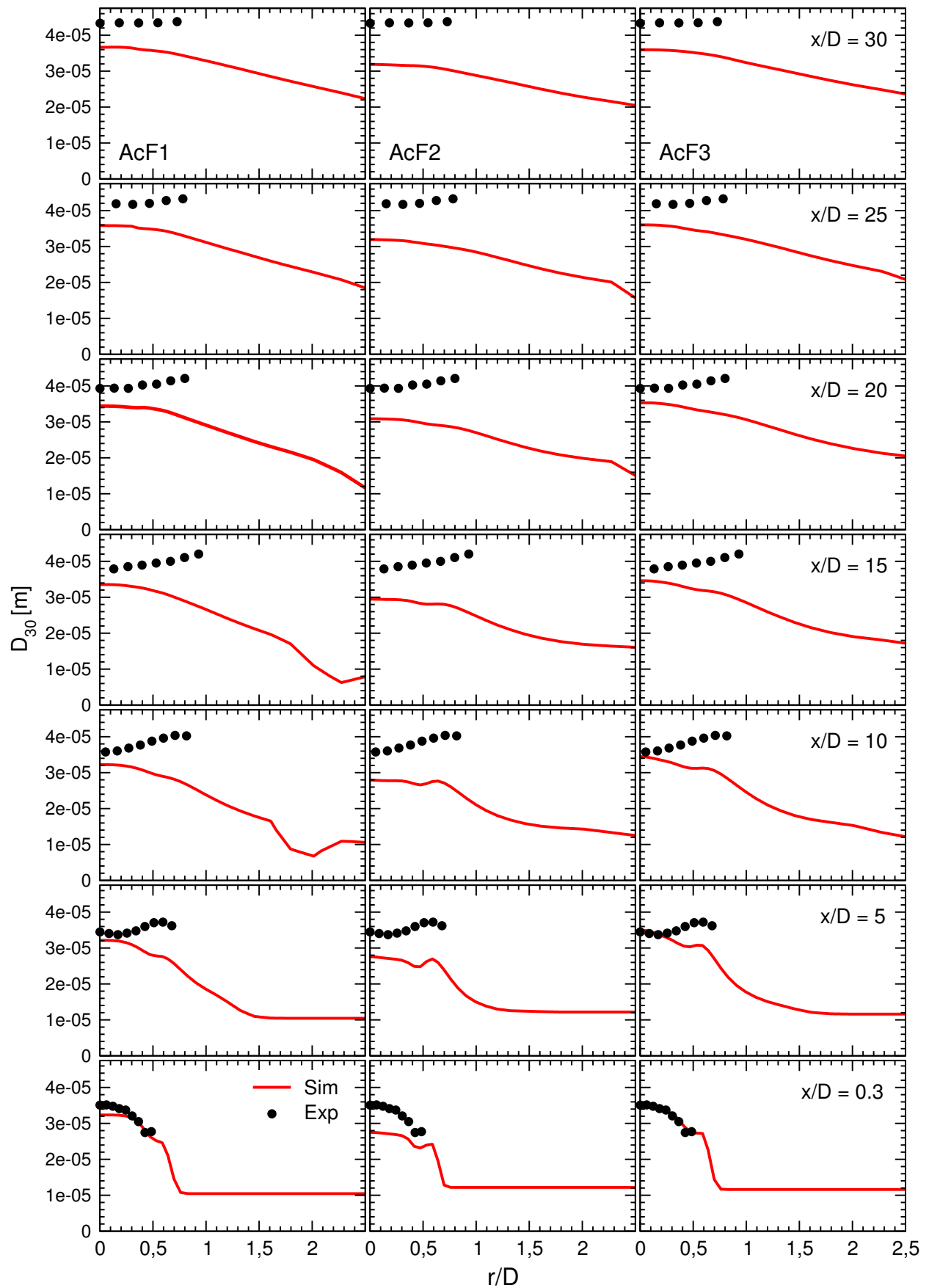


Abbildung 6.7: Radiale Profile des volumenabhängigen mittleren Durchmessers D_{30} an aufsteigenden Messpositionen der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

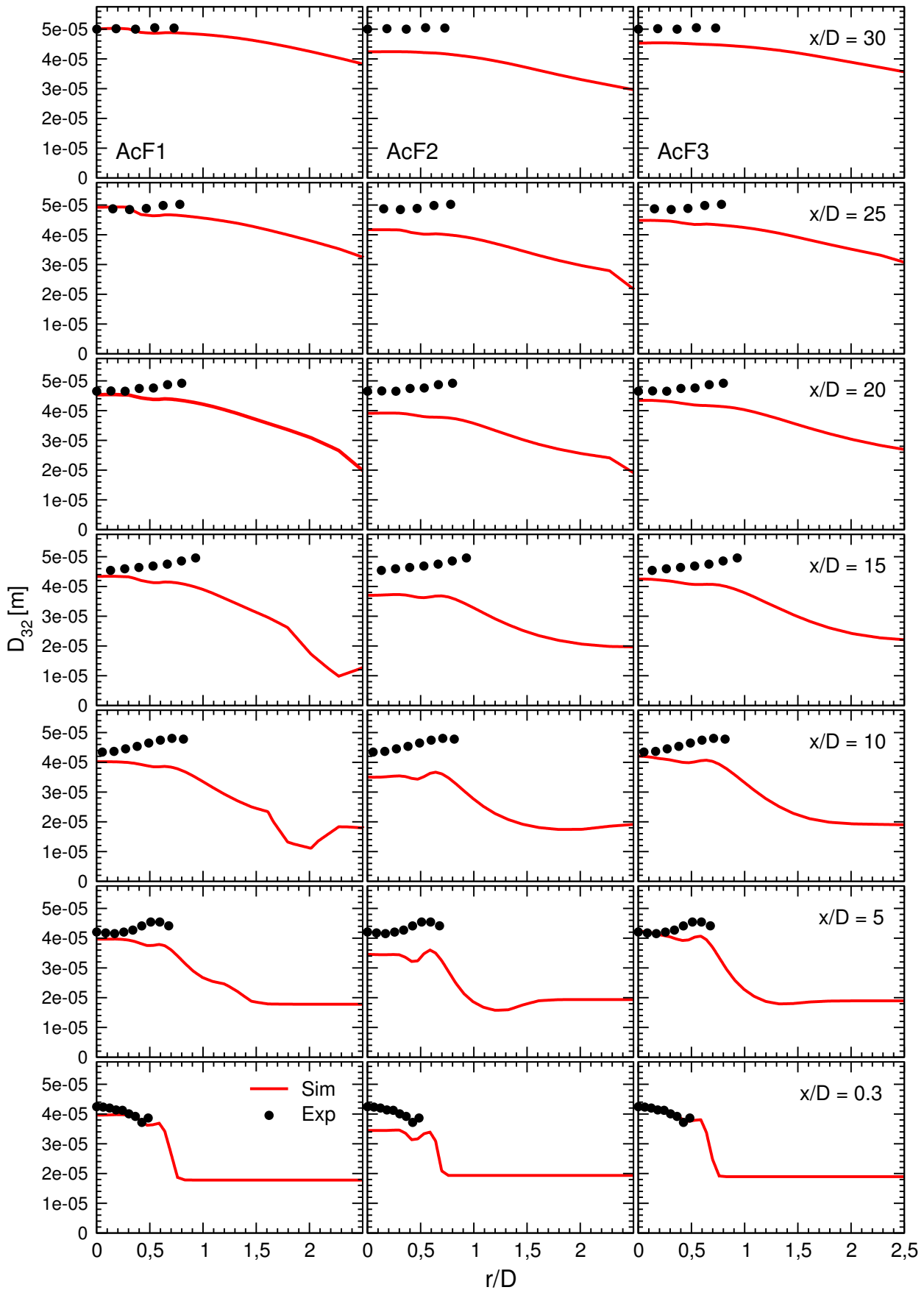


Abbildung 6.8: Radiale Profile des Sauterdurchmessers D_{32} an aufsteigenden Messpositionen stromab von $x/D = 0,3$ der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

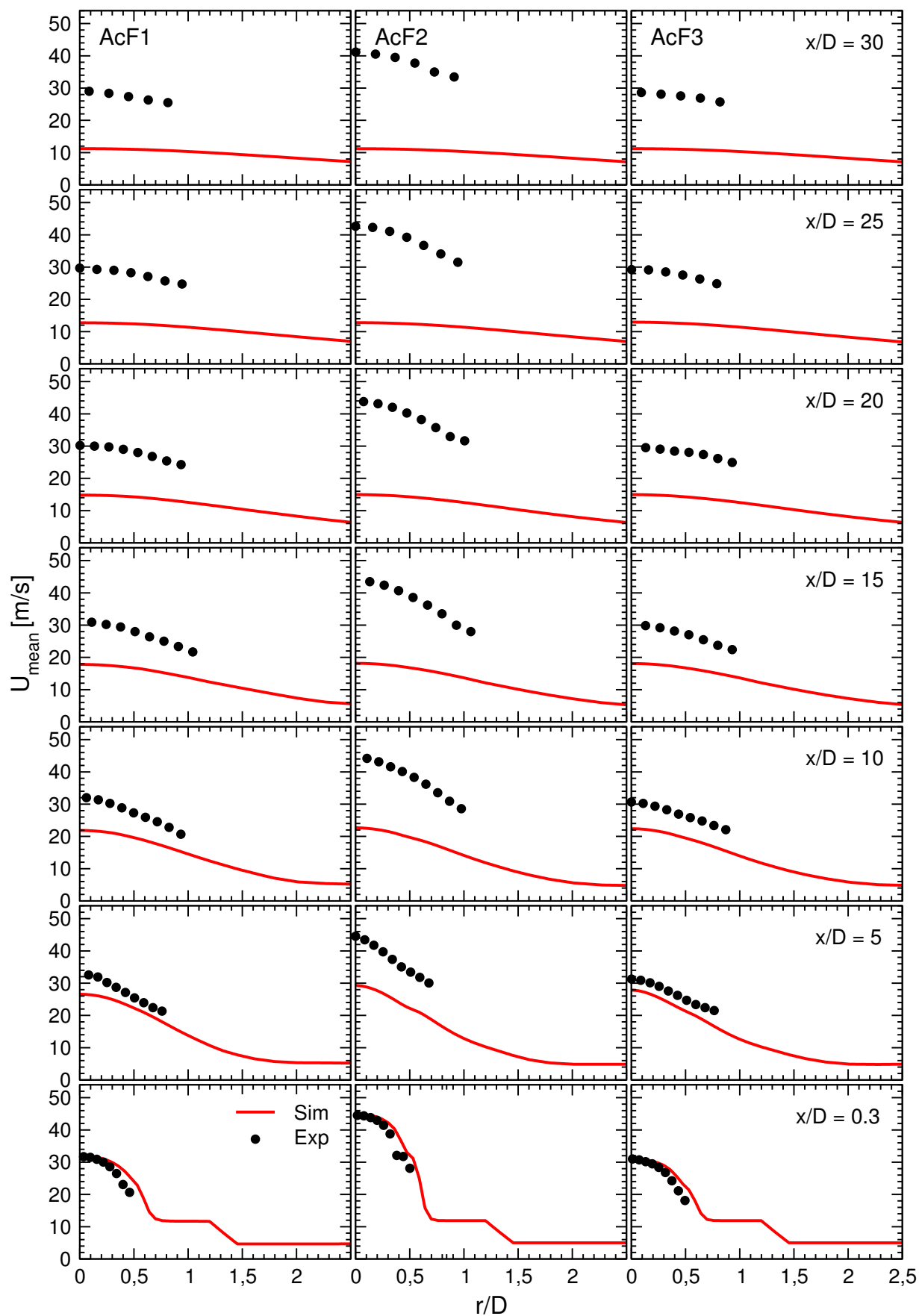


Abbildung 6.9: Radiale Profile der mittleren axialen Geschwindigkeit U_{mean} an aufsteigenden Messpositionen stromab von $x/D = 0,3$ der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

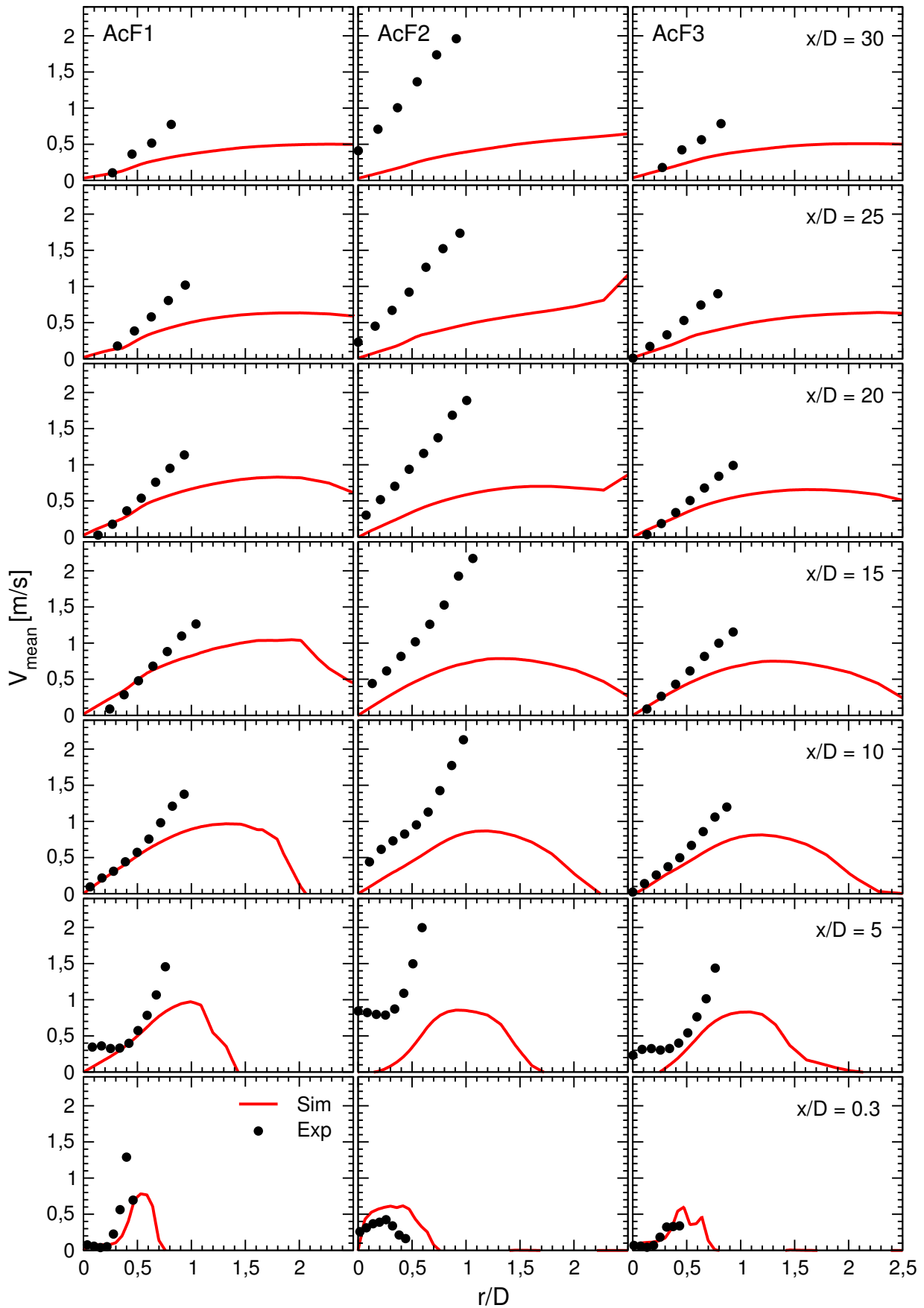


Abbildung 6.10: Radiale Profile der mittleren radialen Geschwindigkeit V_{mean} an aufsteigenden Messpositionen der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

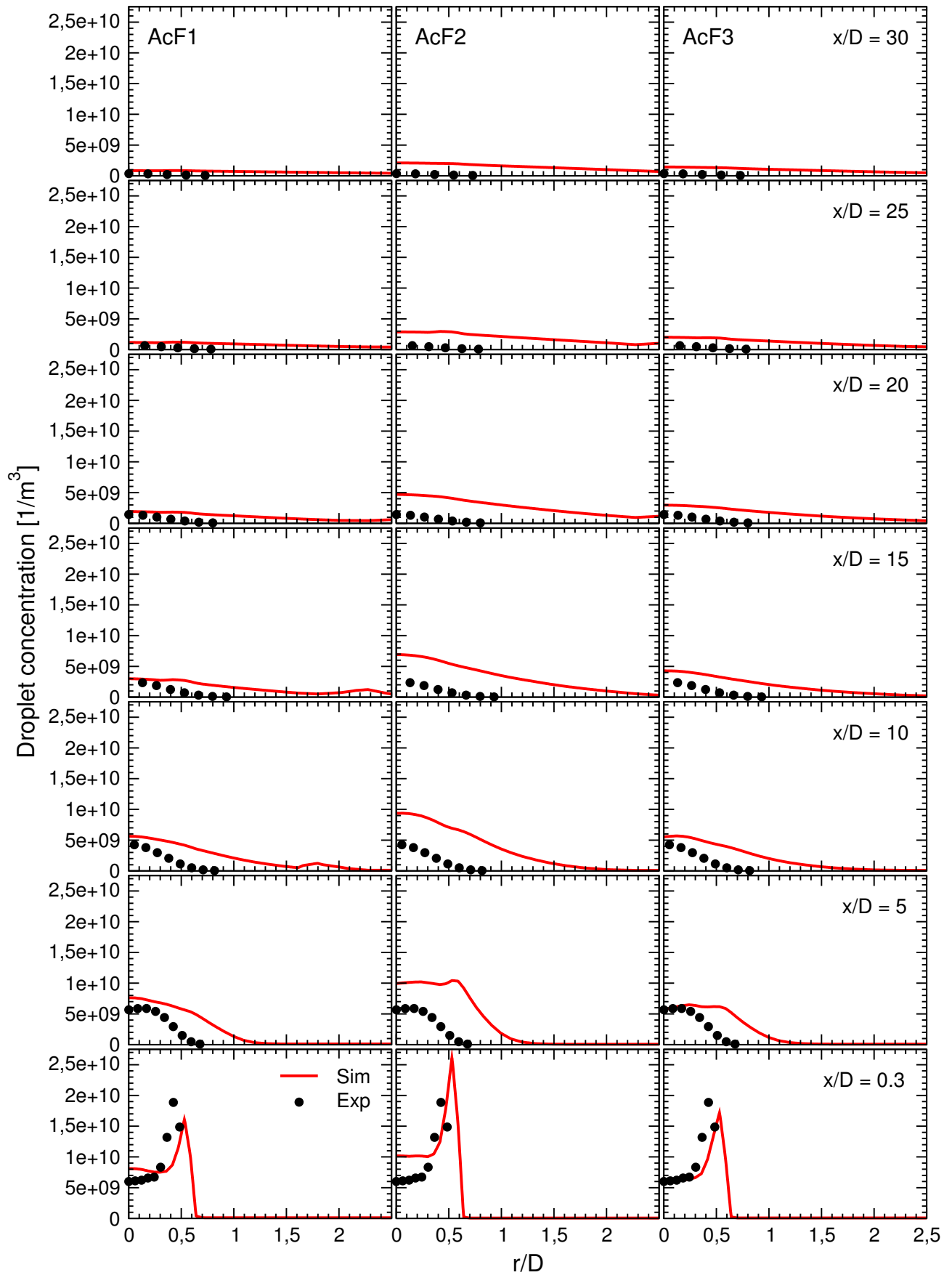


Abbildung 6.11: Radiale Profile der Tropfenkonzentration an aufsteigenden Messpositionen stromab von $x/D = 0,3$ der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

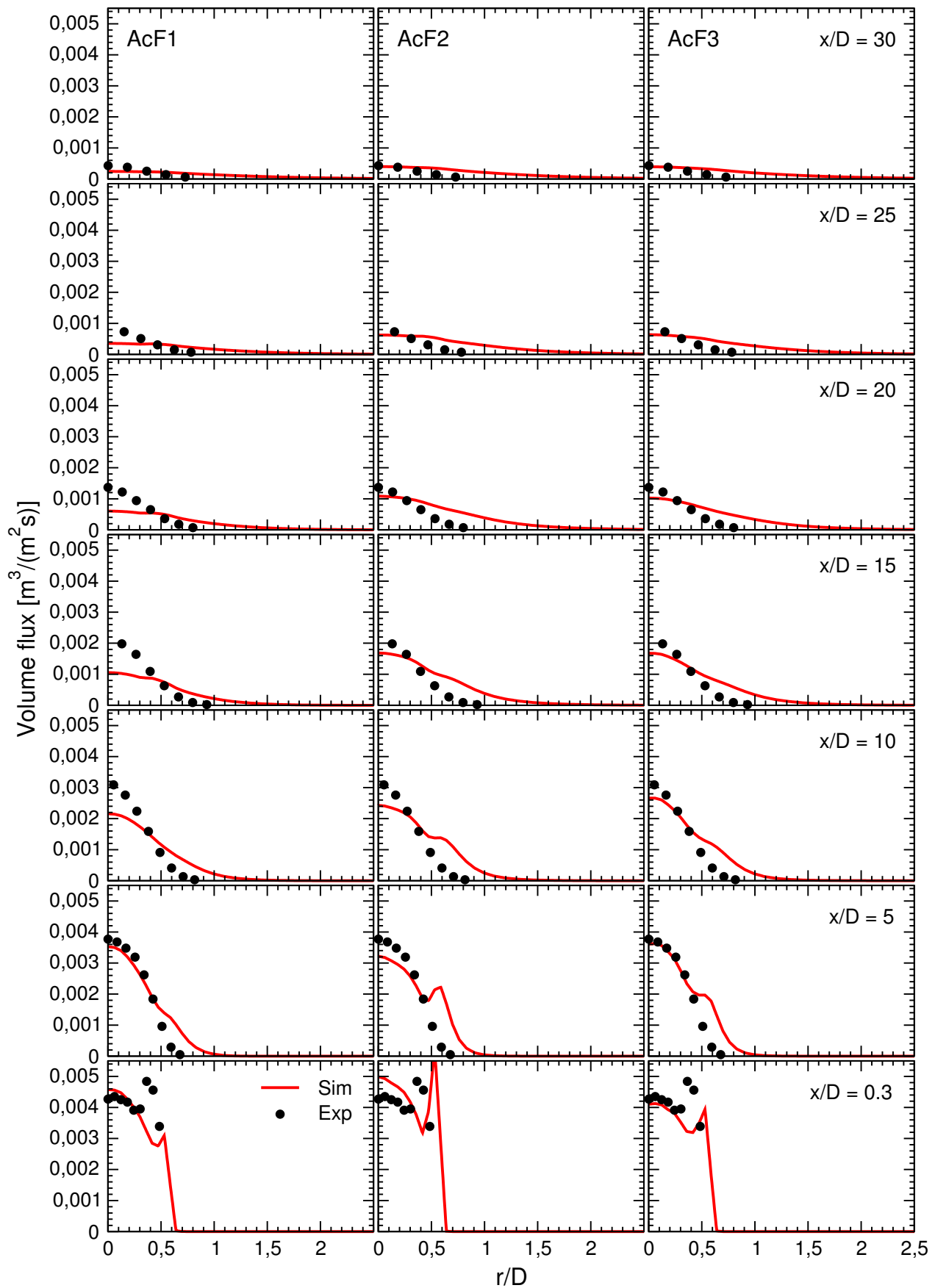


Abbildung 6.12: Radiale Profile des Volumenstroms der dispersen Phase an aufsteigenden Messpositionen stromab von $x/D = 0,3$ der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

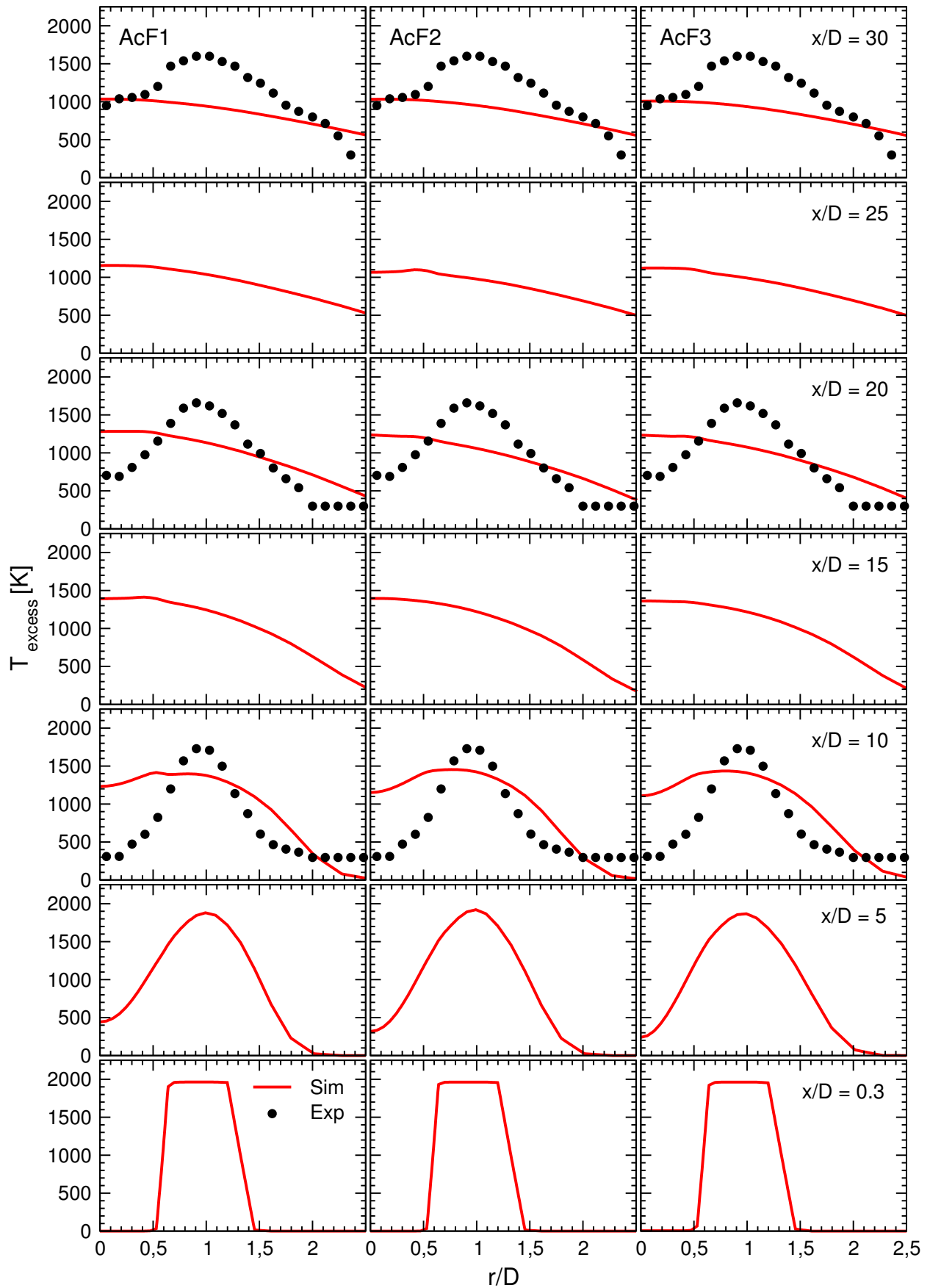


Abbildung 6.13: Radiale Profile der Temperatur T_{excess} an aufsteigenden Messpositionen stromab von $x/D = 0,3$ der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die numerischen Resultate sind mithilfe der durchgehenden Linie dargestellt.

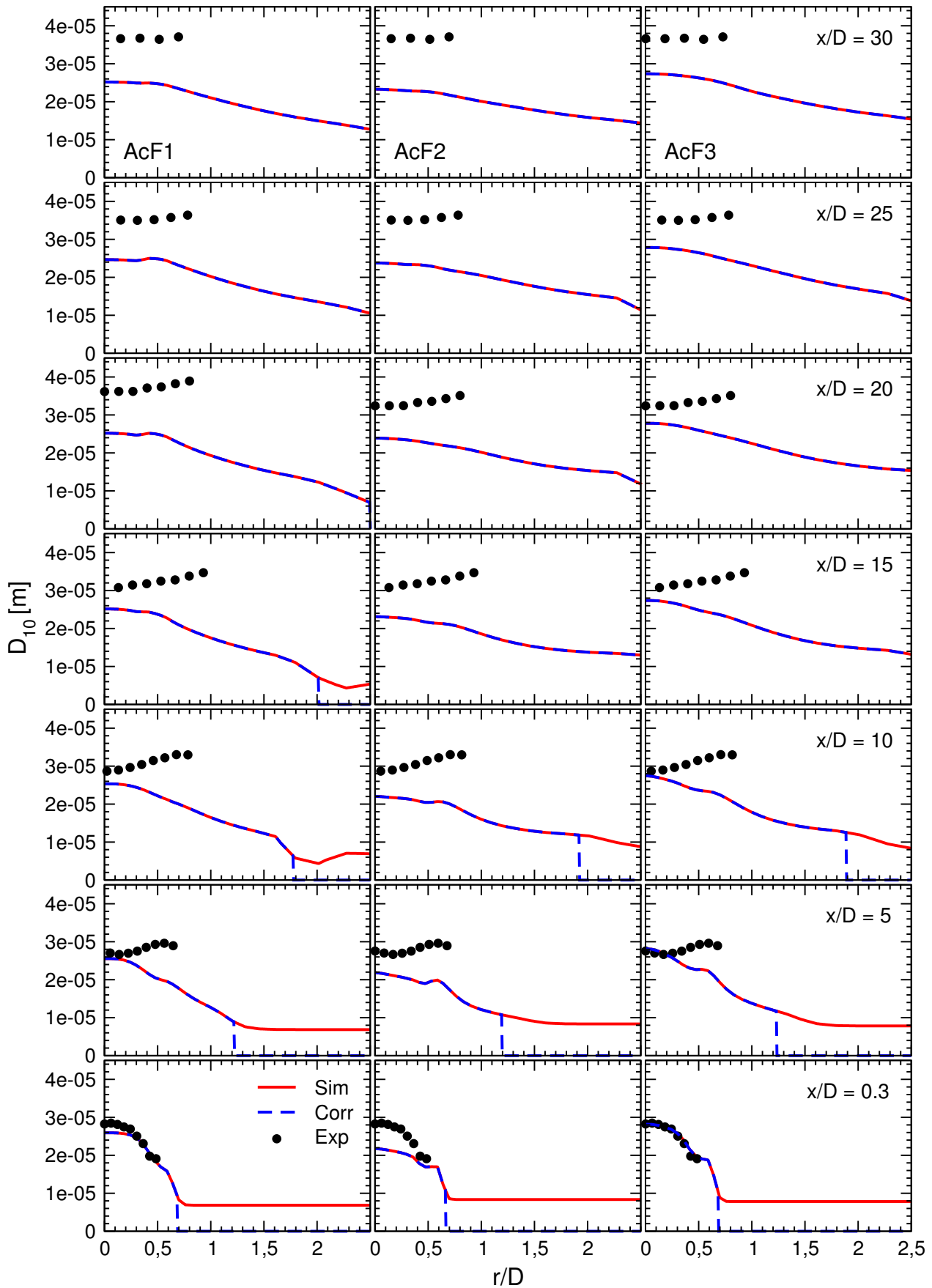


Abbildung 6.14: Radiale Profile des arithmetisch mittleren Durchmessers D_{10} der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die korrigierten numerischen Resultate sind mithilfe der gestrichelten blaue Linie dargestellt.

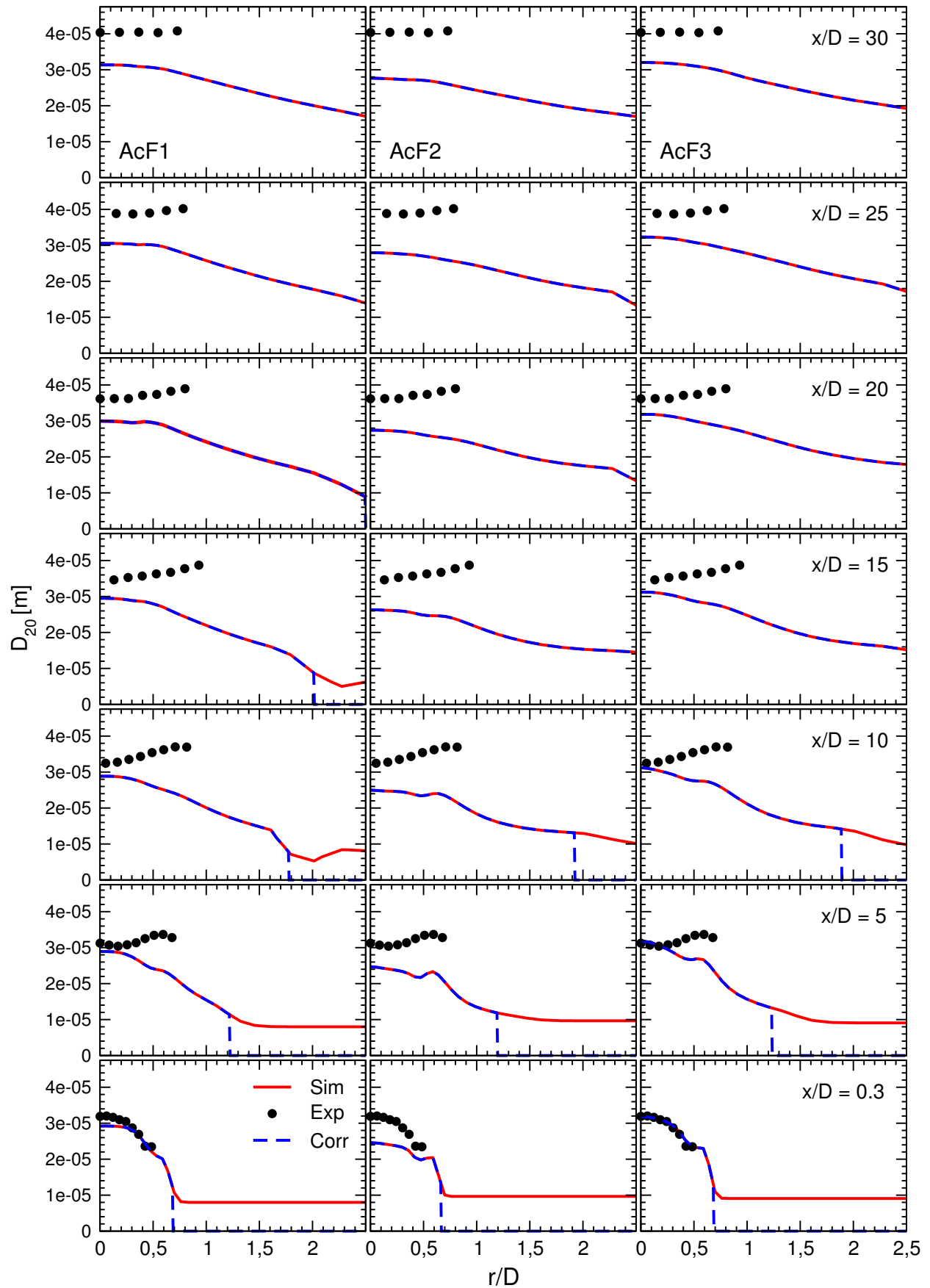


Abbildung 6.15: Radiale Profile des oberflächenabhängigen mittleren Durchmessers D_{20} der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die korrigierten numerischen Resultate sind mithilfe der gestrichelten blaue Linie dargestellt.

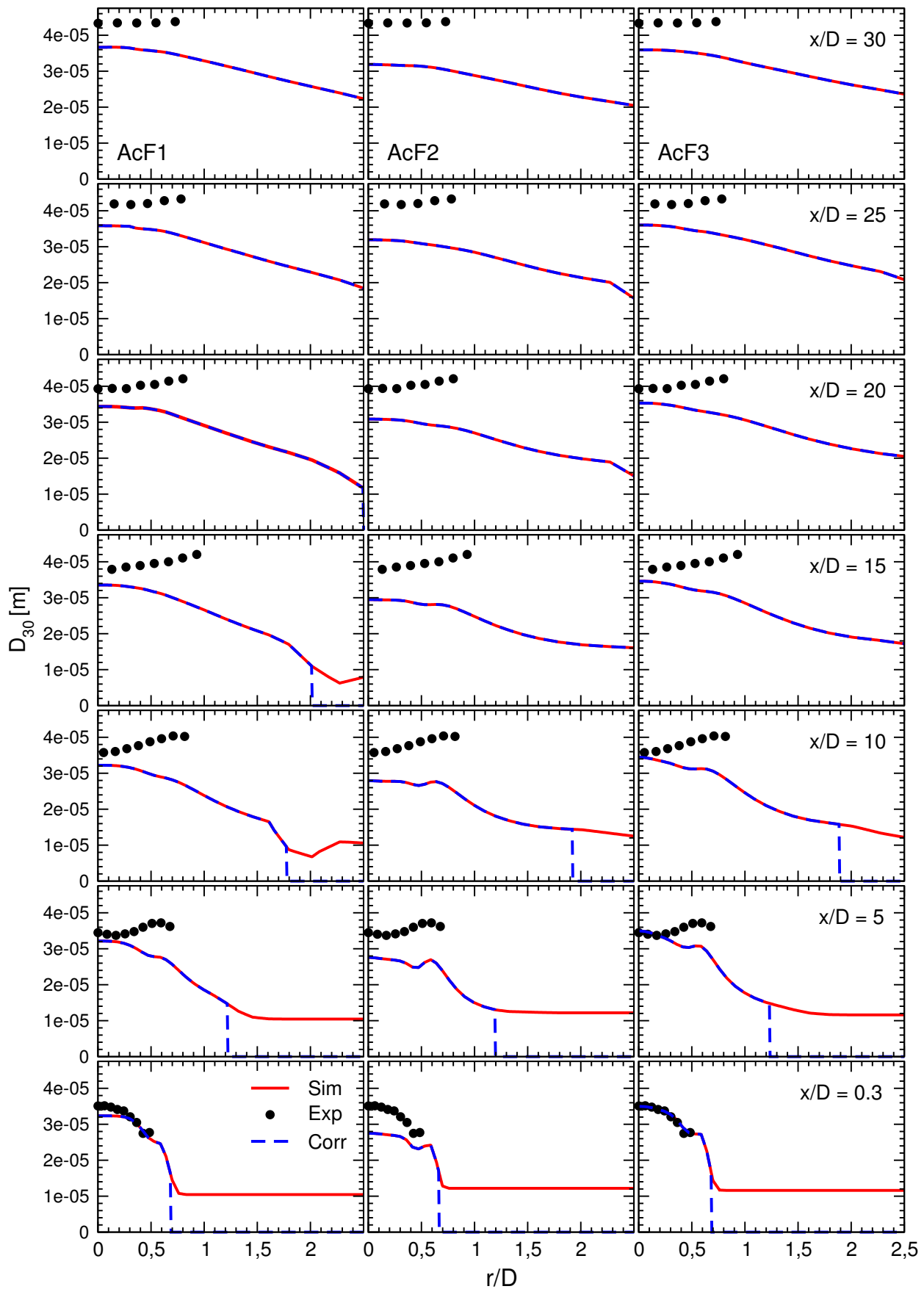


Abbildung 6.16: Radiale Profile des volumenabhängigen mittleren Durchmessers D_{30} der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die korrigierten numerischen Resultate sind mithilfe der gestrichelten blauen Linie dargestellt.

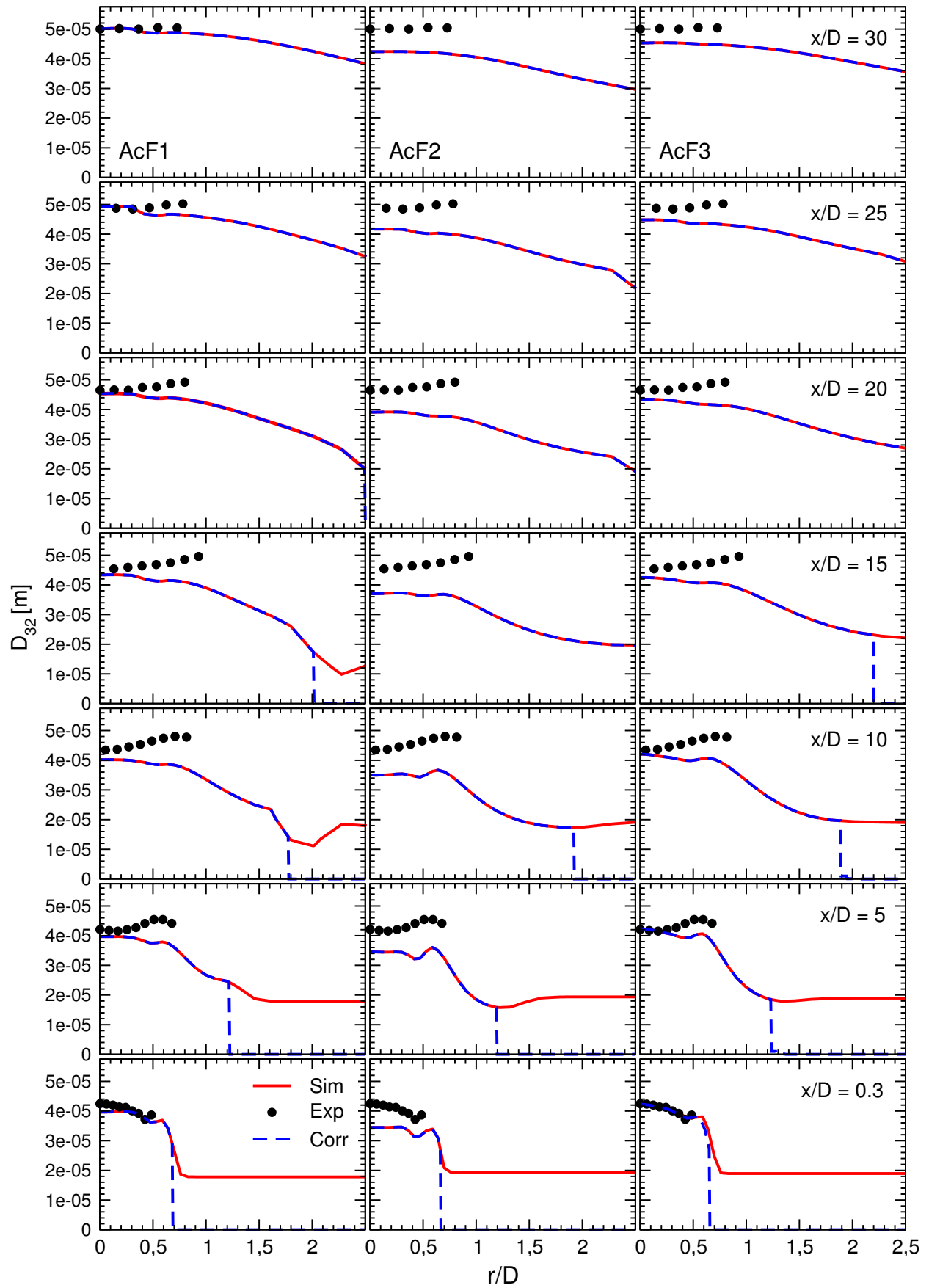


Abbildung 6.17: Radiale Profile des Sauterdurchmessers D_{32} der reaktiven Konfigurationen AcF1 (links), AcF2 (mittig) und AcF3 (rechts). Die korrigierten numerischen Resultate sind mithilfe der gestrichelten blaue Linie dargestellt.

im Jet, sowie in der Scherschicht zum Pilotbrenner maßgeblich bestimmt. Darüber hinausgehend sollte nach Meinung des Autors eine Überprüfung der Annahme einer fünfprozentigen Turbulenzintensität im Pilotbrenner vorgenommen werden.

Hinsichtlich dieser Abweichungen können darüber hinausgehend folgende zwei Aussagen getroffen werden: Die mittler Tropfendurchmesser werden im Bereich des Jets ($0,5 \leq r/d$) und des Pilotbrenners ($0,5 < r/d < 1,19$) unterschätzt, dieser Effekt verstärkt sich stromab des Austritts zunehmend. Die Abweichungen nehmen jedoch mit zunehmender Ordnung der Momente ab. Unter Berücksichtigung, dass der Einfluss der größeren Tropfen auf Momente einer Verteilungsfunktion sich mit zunehmender Ordnung der Momente verstärkt, kann angenommen werden, dass die Konzentration der größeren Tropfen akkurater getroffen wird, als die Konzentration der kleineren Tropfen. Hinsichtlich des Einflusses der dispersen Phase auf die Geschwindigkeit und die Turbulenz der kontinuierlichen Phase kann festgehalten werden, dass eine höhere Tropfenkonzentration zu einem stärkeren Impulstransfer zwischen der dispersen und der kontinuierlichen Phase führt. Weisen die Tropfen hierbei wiederum eine hinreichende Größe auf, können sie die Turbulenz innerhalb der kontinuierlichen Phase verstärken.

Die Profile der radialen und axialen Geschwindigkeiten U_{mean} und V_{mean} werden in der unteren Messebene bei $x/d = 0,3$ hinreichend akkurat getroffen, was darauf hinweist, dass Randbedingungen der experimentellen und der numerischen Konfiguration eine hinreichende Übereinstimmung aufweisen. Abb. 6.9 zeigt hierbei die Notwendigkeit einer Berücksichtigung der reaktionsbedingten Veränderung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase auf. Dies wird insbesondere im Rahmen der Konfiguration AcF2 deutlich, bei der die Abweichungen stromab der Düse präsenter werden. Abb. 6.10 wiederum weist auf eine hinlänglich bekannte Schwäche des k - ε -Modells hin, dahingehend dass die turbulenten, radialen Geschwindigkeitskomponenten eines Freistahls nicht akkurat abgebildet werden [98].

Abb. 6.11 stellt die Verteilung der Tropfenkonzentration dar. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen und den numerischen Resultaten bezüglich der Abnahme der Tropfenkonzentration stromaufwärts, wobei ebenfalls eine erhöhte Dispersion aufgrund der radialen Verteilung zu erkennen ist. Die Konzentrationsabnahme ist konsistent mit der numerisch bestimmten Position der Flamme, wobei in beiden Fällen vereinzelte Tropfen die Flammenfront überschreiten.

Abb. 6.12 beinhaltet die Abnahme des Volumenstromes stromabwärts der Austrittsebene. Der Volumenstrom weist hierbei ebenfalls eine nicht akkurate – da in den Simulationen überschätzte – Dispersion der dispersen Phase auf. Die Abnahme des Volumenstromes ist abermals konsistent mit der numerisch bestimmten Position der Flamme. Es wird ebenfalls eine Unterschätzung des Volumenstromes in der Mittelachse des Brenners festgestellt. Dies entspricht einer Tendenz, die sich auch bereits im Rahmen der nicht-reaktiven Simulationen gezeigt hat [51, 130, 131]. Der numerisch bestimmte Volumenstrom an den Messpositionen $x/d = 5$ und $x/d = 10$ zeigt zudem Einflüsse der turbulenten Scherschicht zwischen dem Jet und dem Piloten, die in den experimentell ermittelten Resultaten nicht vorhanden sind.

Das in Abb. 6.13 abgebildete Temperaturprofil von T_{excess} ist nicht ausgeprägt genug hinsichtlich der umhüllenden Reaktionszone. Die numerisch bestimmte Reaktionszone befindet sich nicht weit genug stromaufwärts der Düse, es wird somit zu viel verdampfter Brennstoff direkt im Anschluss an den Austritt des Jets umgesetzt. Die Gründe für die Positionsunterschiede können in einer überschätzten Turbulenz der kontinuierlichen Phase, sowie in einer überschätzten Varianz $\widetilde{Z''^2}$ des Mischungsbruchs liegen. Eine überschätzte Turbulenz führt hierbei zu einer stärkeren Durchmischung des verdampften Brennstoffs mit der umgebenden Luft, sowie zu einer Verwinklung der Flammenoberfläche, die wieder zu einem erhöhten Brennstoffumsatz führen. Die Varianz $\widetilde{Z''^2}$ des Mischungsbruchs kann hierbei als Maß der Durchmischung zwischen dem verdampften Brennstoff und der Luft angesehen werden. Eine Überschätzung der Varianz würde somit zu einer stärkeren Chemie-Turbulenz-Interaktion innerhalb der FGM-Modells führen, die in Gl. (4.36) vorgestellte Annahme sollte deshalb kritisch überprüft werden. Auch wenn Unterschiede zwischen der Position der Flammenfront auftreten, werden die zu erwartenden Spitzentemperaturen jedoch hinreichend gut getroffen.

Seitens der experimentellen Resultate sei an dieser Stelle darauf verwiesen, dass die Strömungsprofile lediglich für die Konfigurationen AcF2, AcF6 und AcF7 aufgezeichnet wurden. Im Rahmen der durchgeführten Simulationen wurden die Profile entsprechend skaliert. Da der Massenanteil des verdampften Brennstoffs in der Luft jedoch die Viskosität verändert, kann die gemessene axiale und radiale Geschwindigkeit ohne Injektion des Brennstoffs Abweichungen zur tatsächlich vorliegenden aufweisen.

Hinsichtlich der durchgeführten Messungen der Temperatur stellt Abb. 6.18 eine mögliche Korrektur der experimentellen Resultate im Bereich des Jets aufgrund der Benetzung der Oberfläche des Thermoelements mit Brennstofftropfen, sowie einer Strahlungskorrektur, bedingt durch die Eigenstrahlung des Thermoelements, dar. Die Benetzung mit Brennstofftropfen führt hierbei zu einer niedrigeren, experimentell

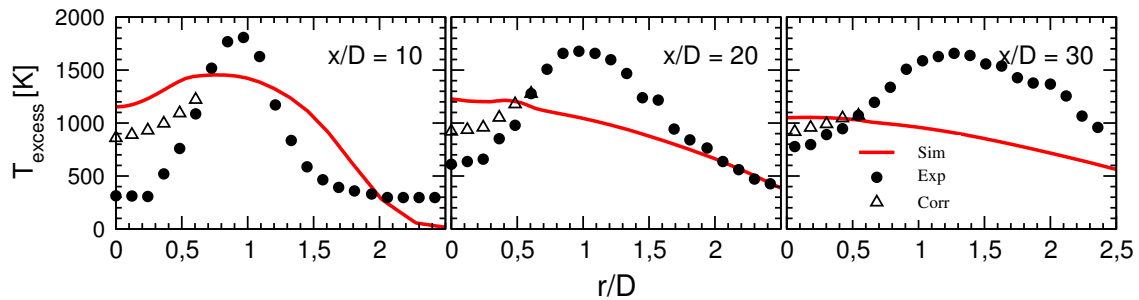


Abbildung 6.18: Darstellung der Temperatur T_{excess} an den Messpositionen $x/D = 10$, $x/D = 20$ und $x/D = 30$ unter Berücksichtigung einer Korrektur hinsichtlich der Benetzungseffekte und der Strahlung im Vergleich zu den numerischen Resultaten mit einer nicht-vorgemischten Tabelle.

bestimmten Temperatur, da der flüssige Brennstoff auf der Oberfläche unter Temperaturentzug verdampft. Eine Strahlungskorrektur aufgrund der thermisch bedingten Eigenstrahlung des Elements wiederführt führt ebenfalls zu höheren Temperaturen. Darüber hinausgehend bleiben mögliche Strahlungseffekte aufgrund der Wandtemperaturen der Einhausung des Windtunnels unberücksichtigt.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass die numerischen Resultate der Konfigurationen AcF1 und AcF3 aussagekräftiger als die der Konfiguration AcF2 sind. Die beiden Konfigurationen weisen hierbei eine moderate Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase bei mittlerer bis hoher Injektionsrate des flüssigen Brennstoffs auf. Die getroffenen Aussagen zur Bewertung dieser Resultate sind konsistent mit den numerischen Resultaten der nicht-reaktiven Konfigurationen. Hinsichtlich der Abweichungen zwischen den Resultaten bei Konfiguration AcF2 kann festgehalten werden, dass möglicherweise die Massen- und Wärmetransferprozesse der großen Tropfen unterschätzt, die der kleinen Tropfen hingegen in der Tendenz überschätzt werden. Diese Annahme würde auch die signifikant abweichende Tropfenkonzentration an den Messpositionen zwischen $x/D = 5$ und $x/D = 20$ erklären. Die Konfiguration AcF2 ist hierbei durch sowohl einen hohen Luft-, als auch Brennstoffdurchsatz charakterisiert.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Den Abschluss vorliegender Ausarbeitung bildet eine Zusammenstellung der hervorhebendsten Aspekte der einzelnen Kapitel und ein Ausblick auf weiterführende Arbeiten. Zielsetzung dieser Arbeit ist die Entwicklung und Bereitstellung eines industriell anwendbaren, numerischen Gesamtverfahren für die Berechnung reaktiver Mehrphasenströmungen im Rahmen von technischen Verbrennungssystemen.

Basierend auf den vielversprechenden Resultaten im Bereich der Modellierung von Massen- und Wärmetransferprozessen für polydisperse, nicht-reaktive Konfigurationen stellt diese Arbeit die thematische Fortsetzung hinsichtlich einer Kopplung mit einem Verbrennungsmodell zur Simulation von reaktiven Konfigurationen dar. Der Fokus liegt hierbei auf der akkuraten Beschreibung der Massen- und Wärmetransferprozesse und der Gemischbildung, sowie des chemischen Umsatzes des Brennstoffs. Die Modellierung des Sprays basiert auf Basis der Williams-Spray-Gleichung, die wiederum die Grundlage der eulerbasierten Momentenmethode, der DQbSMoM, bildet. Die DQbSMoM stellt eine sektionsbasierte Formulierung der Momentenmethode dar, wobei eine Aufteilung der Verteilungsfunktion innerhalb der Sektionen vorgenommen wird. Zur Simulation wurde die DQbSMoM weiterentwickelt und mit einem tabellenbasierten Modell zur Beschreibung der chemischen Reaktionen gekoppelt. Durch die Kopplung der DQbSMoM mit dem FGM-Ansatz sind Wechselwirkungen, wie z. B. der umgebungstemperaturbedingte Anstieg von Massen- und Wärmetransferprozessen innerhalb der dispersen Phase, zu berücksichtigen.

Den Rahmen dieser Arbeit bildet der CFD-Code *PreciseUNS* von *Rolls-Royce Deutschland*. Der Code basiert auf der Finiten-Volumen-Methode für strukturierte und unstrukturierte Rechengitter, unter Berücksichtigung von sowohl kompressiblen, als auch inkompressiblen Strömungen. Die Entwicklung von *PreciseUNS* wird von *Rolls-Royce Deutschland* und Partner-Universitäten, darunter auch der *Technische Universität Darmstadt*, betreut.

7.1 Zusammenfassung

Einleitend werden in Kap. 1 eine allgemeine Motivation für diese Arbeit, der derzeitige Stand der Forschung, sowie die Zielsetzung der Arbeit vorgestellt. Im Anschluss hieran dient das zweite Kapitel 2 der Vorstellung der Grundlagen der Beschreibung von Einphasen- und Mehrphasen-Strömungen. Hierzu werden die Erhaltungsgleichungen der Masse, des Impulses und der Enthalpie, sowie die Transportgleichung eines Skalars vorgestellt. Zusätzlich werden vor dem Hintergrund der Spray-Simulation unterschiedliche Ansätze zur Modellierung der Turbulenz und die Transportgleichungen der turbulenten kinetischen Energie und deren Dissipation behandelt. Basierend auf der Vorstellung der Modellierungsansätze für Mehrphasenströmungen werden, abgeleitet aus den Bilanzgleichungen für einphasige System, die Bilanzgleichungen zur Beschreibung von Mehrphasen-Strömungen, sowie die angewendeten Strategien zur Modellierung des Impulsaustauschs zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase vorgestellt.

Im Folgenden werden die verwendeten methodischen Ansätze der DQbSMoM zur Simulation von reaktiven und nicht-reaktiven Mehrphasen mit ihren charakteristischen Eigenschaften zusammengefasst.

Kopplung der DQMoM mit einer SM – In Kapitel 3 werden zunächst DQMoM-basierte Ansätze nach Fox et al. [35] zur Modellierung von Sprays und den damit zusammenhängenden physikalischen Phänomenen vorgestellt. Im Anschluss hieran erfolgt die Beschreibung der, den Rahmen dieser Arbeit bildenden, sektionsbasierten Formulierung der DQMoM, der DQbSMoM [52]. Ein Nachteil der DQMoM liegt u. A. in der akkuraten Bestimmung des verdampfungsbedingten Momentenflusses,

sowie den auftretenden großen Eigenwertprobleme, sowie schlecht konditionierte Matrizen in Abhängigkeit der gewählten Anzahl an Momenten. Im Rahmen der DQbSMoM wird dieser Aspekt durch die Aufteilung der Verteilungsfunktion in Sektionen vermieden.

Operator-splitting-Ansatz – Zu den hervorhebenswerten Aspekten der DQbSMoM zählt insofern das *operator-splitting*-Verfahren. Diese Methoden (Kap. 5.3.3) basieren auf dem Aufsplitten der Williams-Spray-Gleichung am transienten Term und erlaubt so die separate Behandlung der verschiedenen, auftretenden Phänomene, was wiederum zu einer Reduktion der Komplexität und somit zu einer Verbesserung der numerischen Stabilität führt. Die separate Behandlung der auftretenden Phänomene resultiert in Gleichungen zur Beschreibung des Transports im physikalischen Raum, dieser lässt sich mit einer Multi-Fluid-Methode beschreiben, und in Gleichungen zur Beschreibung des Transports im phasenbasierten Raum. Die auf einen Tropfen wirkenden Kräfte werden hierbei im physikalischen Raum dargestellt, die Modellierung des Massen- und Wärmetransfers, sowie der Koaleszenz wird im phasenbasierten Raum vorgenommen.

EMSM-Modell – Das EMSM-Modell (Kap. 3.2.4) macht die Kopplung zwischen der DQMoM mit der SM erst möglich, da somit der Momentenfluss über die Sektionsgrenzen hinweg beschrieben werden kann. Die anschließende Rekonstruktion erfolgt mit der Methode der maximalen Entropie auf Basis der berechneten Momente. Nach dem derzeitigen Wissensstand des Autors erstmals mit realistischen Modellen zur Beschreibung der Massen- und Wärmetransferprozesse, sowie der chemischen Reaktionen gekoppelt. Im Rahmen der Simulation der reaktiven Strömungen wird ein angepasster Momentenflussvektor zur Beschreibung des verdampfungsbedingten Momentenflusses über die Sektionsgrenzen hinweg angewendet, siehe Kap. 4.4.2.

Die zur Modellierung reaktiver Mehrphasenströmungen erforderlichen Ansätze zur Beschreibung der Turbulenz, der Koaleszenz, sowie der Massen- und Wärmetransferprozesse und der chemischen Reaktionen werden mit Hinsicht auf ihre Akkuratheit, den Rechenaufwand und die Kombinierbarkeit mit bereits bestehenden Ansätzen gewählt.

Turbulenz – Die Turbulenz der kontinuierlichen Phase wird mit einem modifizierten k - ε -Modell, basierend auf einem Favre-Mittelungsansatz, abgebildet. Die turbulente Interaktion zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase wird im Rahmen der DQbSMoM mit dem Modell von Simonin und Viollet approximiert. Die Details dieses Ansatzes werden in Kap. 2.2.6 vorgestellt.

Massen- und Wärmetransferprozesse – Zur akkuraten Beschreibung der Massen- und Wärmetransferprozesse erfolgt die Implementierung eines realistischen, auf dem Gleichgewichts- und eines auf dem Nicht-Gleichgewichtsansatzes basierenden Modells innerhalb DQbSMoM, bzw. der EMSM-Methode. Die Temperatur innerhalb der Tropfen ist zwar veränderlich, jedoch über den gesamten Durchmesser einheitlich. Nicht-Gleichgewichtsmodelle weisen gegenüber Gleichgewichtsmodellen Vorteile bei hohen Relativgeschwindigkeiten zwischen den Phasen, geringen Tropfendurchmessern und einem großen Temperaturunterschied zwischen den Phasen auf. Um den temperaturbedingt gesteigerten Massen- und Wärmetransferprozessen Rechnung zu tragen, wird eine dynamische Subiteration auf Basis einer »Verdampfungs-CFL-Zahl« angewendet, siehe Kap. 4.4.1.

Koaleszenz – Die Tropfenkoaleszenz resultiert aus einem Zusammenstoß zweier Tropfen in Sprays mit hohem Volumenanteil der dispersen Phase, bzw. in Regionen mit vielen Tropfen und dem entsprechenden dichten Sprayregime. Durch den Operator-splitting-Ansatz ist eine separate Behandlung der physikalischen Phänomene möglich – der die Koaleszenz beschreibende Term wird in zwei Bestandteile, einen Produktions- und einen Dissipationsterm aufgeteilt und anschließend numerisch integriert (Kap. 3.2.4). Der Quell- und Senkterm wird basierend auf der kinetischen Gastheorie und einer statistischen Beschreibung der Kollisionen beschrieben. Die Korrelation aus Größe und Geschwindigkeit wird mit einem Polynom, das ursprünglich im Rahmen der CSVM-Methode findet, beschrieben.

Verbrennungsmodellierung – Der im Rahmen dieser Arbeit verwendete tabellarische Ansatz der FGM basiert auf einer separaten, detaillierten Flammenberechnung im Vorfeld der eigentlichen Simulation mit der Software *Chem1D*, siehe Kap. 4.3.2. Die Idee dieses Ansatzes beruht darauf, dass eine sich ausbreitende Flamme anhand einer Vielzahl kleiner, eindimensionaler Flammen dargestellt werden kann, die im Anschluss in einer Tabelle zusammengefasst werden. Von Vorteil ist, dass das FGM-Modell sowohl zu akkuraten Resultaten führt, als auch weit verbreitet ist und somit eine Vielzahl von Reaktionsmechanismen zur Tabellengenerierung existieren. Der Tabellenzugriff während der Simulation wird mithilfe sog. Kontrollvariablen realisiert. Im vorliegenden Fall werden der gemittelte Mischungsbruch \tilde{Z} , die Varianz des Mischungsbruchs \tilde{Z}''^2 , die Reaktionsfortschrittsvariable C als Kontrollvariablen verwendet. Die Beschreibung der Interaktion von turbulenten Strukturen mit den chemischen Reaktionen wird mithilfe einer mischungsbruchbasierten, vorangenen β -Verteilungsfunktionen durchgeführt. Das FGM-Modell ist in den *Operator-splitting*-Ansatz eingebunden und die Interaktion mit dem gewählten realistischen Massen- und Wärmetransfermodell konnte nachgewiesen werden.

Die Verifizierung und Validierung der Kopplung zwischen der Modellierung der Massen- und Wärmetransferprozesse und der Verbrennungsmodellierung erfolgt im Rahmen eines polydispersen, reaktiven Sprays Gounder [47]. Die erzielten numerischen Resultate werden mit experimentellen Resultaten von drei ausgewählten Konfigurationen – AcF1, AcF2 und AcF3 – des sog. Sydney-Spray-Brenners für flüssige Brennstoffe unter atmosphärischen Umgebungsbedingungen verglichen. Ein direkter Vergleich der Konfigurationen AcF1 und AcF3 zeigt, dass sich zwar die Hauptgeschwindigkeit mit 24 m/s, sowie der Massenfluss der Luft mit 150 g/min auf dem gleichen Niveau befinden, der Massenstrom des flüssigen Brennstoffs von AcF3 mit 45 g/min aber niedriger ist, als der von AcF1 mit 75 g/min. Ein hoher Anteil des Acetons ist bei allen drei Konfigurationen in der ersten Messposition bereits verdampft. AcF2 weist bei gleichbleibender Injektionsrate des Brennstoffs wie AcF1 einen höheren Massenfluss der Luft, und damit auch eine höhere Geschwindigkeit des Jets auf. Im Anschluss an die Beschreibung des experimentellen und numerischen Aufbaus erfolgt die Bewertung der Simulationsergebnisse anhand eines Vergleiches zwischen den mittleren Durchmessern D_{10} , D_{20} und D_{30} , sowie des Sauterdurchmessers D_{32} , der axialen und radialen Geschwindigkeit U_{mean} und V_{mean} , der Tropfenzkonzentration und des dispersen Volumenstromes, sowie der normierten Temperatur der Gasphase T_{excess} . Die Auswertung ist vielversprechend, obgleich die im Ausblick erwähnten Punkte nach Meinung des Autors bei weiteren Schritte Berücksichtigung finden sollten.

7.2 Ausblick

Die DQbSMoM bietet in der derzeitig vorliegenden Form eine Vielzahl von Schnittstellen für weiterführende Modellierungsansätze und Aufgaben. Hierbei ist jedoch zu berücksichtigen, dass die Momentenmethoden im besonderen für die Simulation von polydispersen Spray-Systemen geeignet sind, für eine detaillierte Betrachtungen der auftretenden physikalischen Phänomene sollte jedoch gegebenenfalls auf Lagrange-basierte Methode zurückgegriffen werden. Weiterführende Schritte im Rahmen der DQbSMoM könnten daher folgende Ansätze beinhalten:

- Die Anwendung numerischer Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung zur Approximation des konvektiven Flusses, um Diskontinuitäten und Schocks im Skalar- und Vektorfeld abzubilden.
- Die Anwendung komplexerer Turbulenzmodelle, wie z. B. dem *realisable-k-ε*-Modell oder dem LES-Modell. Eine Anwendung komplexerer Turbulenzmodelle sollte hierbei zu einer höheren Vorhersagegenauigkeit des Strömungsfelds, sowie der Produktion und Dissipation turbulenter Strukturen führen. Darüber hinausgehend werden in den beiden genannten Modellen die radialen Geschwindigkeitsfelder akkurater wiedergegeben.

- Die beschriebenen numerischen Konfigurationen beruhen auf einer monokinetischen Annahme, da die Tropfengeschwindigkeit auf den Tropfendurchmesser konditioniert ist. Zur Darstellung von *Jet-in-crossflow*-Konfigurationen bietet sich daher die Verwendung der von Vié et al. [139] beschriebenen CSVM-Methode an. Ebenfalls von Bedeutung kann vor diesem Hintergrund der Aspekt sich kreuzender Tropfentrajektorien sein.
- Zur Darstellung der Chemie-Turbulenz-Interaktion kann, anstelle der vorangenommenen Verteilungsfunktion, ebenfalls eine momentenbasierte Verteilungsfunktion angewendet werden. Die Verteilungsfunktion wird bei diesem Ansatz, ebenso wie z. B. die Verteilungsfunktion der Tropfendurchmesser, durch Lösen von Transportgleichungen von beschreibenden Momenten rekonstruiert. Eine momentenbasierte Verteilungsfunktion stellt hierbei einen Kompromiss zum detaillierten, jedoch rechenzeitintensiven Ansatz der transportierten Verteilungsfunktion dar und einer vorangenommenen Verteilungsfunktion.
- Die Überprüfung der Generierung der Einlassbedingungen hinsichtlich der initialen Aufteilung der Verteilungsfunktion in Sektionen, der Generierung des Geschwindigkeitsfeldes als Einlassbedingung, sowie der Volumenanteile der dispersen Phase.
- Die Implementierung eines Modelles zur Darstellung der Dispersion, um die Aufweitung eines Jets mit höherer Genauigkeit abbilden zu können. Somit kann sichergestellt werden, dass der Austrittswinkel eines Brennstoff-Jets akkurat wiedergegeben wird.
- Die Implementierung eines Flammensensors zur Unterscheidung zwischen einem vorgemischten und nicht-vorgemischtem Verbrennungsregime. Insbesondere bei Konfigurationen mit flüssigen Brennstoffen kann lokal ein variierendes Äquivalenzverhältnis vorliegen, was wiederum zu einem variierenden Verbrennungsregime führt.
- Die Berücksichtigung einer Zwei-Wege-Kopplung bei der Temperatur der kontinuierlichen Phase mit den verdampfungsbedingten Kühleffekten, die wiederum entweder bei der Generierung der Tabelle oder über einen separaten Quellterm berücksichtigt werden können.
- Die Berücksichtigung der Veränderung der Geschwindigkeit der kontinuierlichen Phase aufgrund der reaktiven Umgebungsbedingungen. Mit diesem Ansatz kann der dichteabhängigen Beschleunigung Rechnung getragen werden.
- Die Beschreibung der temperaturabhängigen Dichteänderung zur Darstellung von instationären Wärmetransferprozessen, und um den Umgebungsbedingungen in reaktiven Strömungen Rechnung zu tragen.

Der nächste Schritt der Validierung mit der Kopplung zwischen der DQbSMoM liegt nach Meinung des Autors in der Simulation weiterer reaktiver Spray-Konfigurationen. Darüber hinausgehend sollte eine Optimierung des Codes hinsichtlich der optimalen Parallelisierung des Codes und der zu erwartenden Rechenzeit, sowie ein direkter Vergleich mit einer stochastischen Lagrange-Methode auf Basis einer definierten experimentellen Konfiguration durchgeführt werden.

Mit der vorliegenden Arbeit als Ergebnis einer breit gefächerten Forschung im Bereich der Momentenmethoden und der Verbrennung über einen Zeitraum von vier Jahren liegt nun ein mögliches numerisches Gesamtverfahren zur Entwicklung und Optimierung von Verbrennungsprozessen vor. Im Wissen um ansteigende Brennstoffpreise und zukünftige strengere Emissionsgesetze soll dies ein Beitrag zur Verbesserung der derzeitigen Möglichkeiten sein, und weitere Entwicklungen zu inspirieren.

Literaturverzeichnis

- [1] *Kassensturz für den Weltklimavertrag - der Budgetansatz : Sondergutachten/WBGU, Wissenschaftliche Beirat der Bundesregierung Globale Umweltveränderungen*. 2009. – ISBN 978-3-936191-26-4
- [2] ABRAMZON, B. ; SAZHIN, S.: Convective vaporization of a fuel droplet with thermal absorption. In: *Fuel* 85 (2006), S. 32–46
- [3] ABRAMZON, B. ; SAZHIN, S.: Convective vaporization of a fuel droplet with thermal radiation absorption. In: *Fuel* 85 (2006), S. 32–46
- [4] ABRAMZON, B. ; SIRIGNANO, W.A.: Droplet vaporization model for spray combustion calculations. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 32 (1989), S. 1605–1618
- [5] ACHER, T. ; DEMS, P. ; LENZ, S. ; GOBERT, C. ; POLIFKE, W.: A Quadrature Method of Moments for Polydisperse Flow in Bubble Columns Including Poly-Celerity, Breakup and Coalescence. In: *The Journal of Computational Multiphase Flows* 6 (2014), S. 457–474
- [6] ALI, S. ; VIKHANSKY, A. ; LØVÅS, T.: Direct Quadrature Conditional Moment Closure for Modelling of Turbulent Combustion. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 87 (2011), Oct, Nr. 2, 493–509. <http://dx.doi.org/10.1007/s10494-010-9318-8>. – DOI 10.1007/s10494-010-9318-8. – ISSN 1573-1987
- [7] ASCHMONEIT, K.: *Numerische Beschreibung technischer Verbrennungssysteme*. Göttingen, Technische Universität Darmstadt, Diss., March 2014. <http://tubiblio.ulb.tu-darmstadt.de/64921/>. – Zugl.: Darmstadt, Techn. Univ., Diss., 2013
- [8] BALAJI, B. ; RAGHAVAN, V. ; RAMAMURTHI, K. ; GOGOS, G.: A numerical study of evaporation characteristics of spherical n-dodecane droplets in high pressure nitrogen environment. In: *Physics of Fluids* 23 (2011), S. 1–14
- [9] BETELIN, V.B. ; SMIRNOV, N.N. ; NIKITIN, V.F. ; DUSHIN, V.R. ; KUSHNIRENKO, A.G. ; NERCHENKO, V.A.: Evaporation and ignition of droplets in combustion chambers modeling and simulation. In: *Acta Astronautica* 70 (2012), S. 23–35
- [10] BRITTON, L.G.: Using material data in static hazard assessment. In: *Plant Operations Prog.* 11 (1992), Nr. 2, S. 56–70
- [11] BRÄUNLING, Willy J.: *Flugzeugtriebwerke: Grundlagen, Aero-Thermodynamik, ideale und reale Kreisprozesse, Thermische Turbomaschinen, Komponenten, Emissionen und Systeme*. 3. Auflage. Heidelberg : Springer, 2009. – ISBN 978-3-540-76370-3
- [12] CHAUVEAU, C. ; HALTER, F. ; LALONDE, A. ; GÖKALP, I.: An experimental study on the droplet vaporization: Effects of heat conduction through the support fiber. In: *European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Como Lake, September 2008
- [13] CHAUVEAU, Christian ; BIROUK, Madjid ; GÖKALP, Iskender: An analysis of the d^2 -law departure during droplet evaporation in microgravity. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 37 (2011), S. 252–259
- [14] CHIANG, C.H. ; SIRIGNANO, W.A.: Numerical analysis of convecting, vaporizing fuel droplet with variable properties. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 35 (1992), S. 1307–1324

-
- [15] CHIU, H. H. ; KIM, H. Y. ; CROKE, E. J.: Internal group combustion of liquid droplets. In: *Symposium (International) on Combustion* 19 (1982), Nr. 1, 971–980. [http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(82\)80273-7](http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(82)80273-7). – DOI [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(82\)80273-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(82)80273-7). – ISSN 0082–0784. – Nineteenth Symposium (International) on Combustion
- [16] CHOI, Du-Fhan: *Simulation von Mehrphasenströmungen mit einer Multi-Fluid-Methode*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2010
- [17] CHRIGUI, Mouldi: *Eulerian-Lagrangian Approach for Modeling and Simulations of Turbulent Reactive Multi-Phase Flows und Gas Turbine Combustor Conditions*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2005
- [18] CLIFT, R. (Hrsg.) ; GRACE, J. R. (Hrsg.) ; WEBER, M. E. (Hrsg.): *Bubbles, Drops and Particles*. 3. Auflage. New York : Academic Press, 1978. – ISBN 9780121769505
- [19] CROWE, C. T. (Hrsg.) ; SCHWARZKOPF, J. D. (Hrsg.) ; SOMMERFELD, M. (Hrsg.) ; TSUJI, Y. (Hrsg.): *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 3. Auflage. Boca Raton : CRC Press, 1998. – ISBN 978–1439840504
- [20] CROWE, C. T. ; TROUTT, T. R. ; CHUNG, N. J.: Numerical models for two-phase turbulent flows. In: *Annual Review Fluid Mechanics*, Center for Fluid Mechanics, 1996, S. 11–43
- [21] DESJARDINS, O. ; FOX, R. O. ; VILLEDIEU, P.: A quadrature-based moment closure for the Williams spray equation. In: *Proceedings of the Summer Programm 2006*, 2006, S. 223–234
- [22] DESJARDINS, O. ; FOX, R. O. ; VILLEDIEU, P.: A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2008), S. 2514–2539
- [23] DESJARDINS, O. ; MOUREAU, V. ; PITSCH, H.: An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2008), Nr. 18, 8395–8416. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.05.027>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.05.027>. – ISSN 0021–9991
- [24] DIRBUDE, Sumer ; ESWARAN, Vinayak ; KUSHARI, Abhijit: Droplet evaporation modeling of some conventional and alternative fuels at low pressure. In: *National Conference in Fluid Mechanics and Fluid Power*. Madras, December 2010
- [25] DOUÉ, N. ; LE CLERCQ, P. ; AIGNER, M.: Validation of a multicomponent droplet evaporation model based on continuous thermodynamics. In: *European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Kyoto, August 2006
- [26] DOWNING, G. C. The Evaporation of Drops of Pure Liquids at Elevated Temperatures: Rates of Evaporation and Wet-Bulb Temperatures. In: *America Institut of Chemical Engineers Journal* 12 (1966), S. 760–766
- [27] DUFOUR, G. ; VILLEDIEU, P.: The sectional method revisited for evaporating sprays. In: *mathematical Modelling and Numerical Analysis* 39 (2005), S. 931–963
- [28] DUSHIN, V. R. ; KULCHITSKIY, A. V. ; NERCHENKO, V. A. ; NIKITIN, V. F. ; OSADCHAYA, E. S. ; PHYLIPPOV, Yu. G. ; SMIRNOV, N. N.: Mathematical simulation for non-equilibrium droplet evaporation. In: *Acta Astronautica* 63 (2008), S. 1360–1371
- [29] ELGHOBASHI, S.: On Predicting Particle-Laden Turbulent Flow. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 52 (1994), S. 309–329
- [30] FAETH, G. M. ; LAZAR, R. S.: Fuel droplet burning rates in a combustion gas environment. In: *AIAA Journal* 9 (1971), S. 2165–2171
-

-
- [31] FEDKIW, R. P. ; ASLAM, T. ; MERRIMAN, B. ; OSHER, S.: A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method). In: *Journal of Computational Physics* 152 (1999), Nr. 2, 457–492. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6236>. – DOI <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6236>. – ISSN 0021–9991
- [32] FERZIGER, J. H. (Hrsg.) ; PERIĆ, M. (Hrsg.): *Numerische Strömungsmechanik*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 2008. – ISBN 978–3–540–68228–8
- [33] FORUM, Message Passing I.: *Message Passing Interface*. <http://www.mpi-forum.org/>, . – Zugriff Juni 2017
- [34] FOUQUET, D. ; NYSTEN, J. V.: In: *International Journal for Electricity and Heat Generation VGB Powertech* 2 (2016), Nr. 1, 22–23 S.
- [35] FOX, R. O. ; LAURENT, F. ; MASSOT, M.: Numerical simulation of spray coalescence in an Eulerian framework: Direct quadrature method of moments and multi-fluid method. In: *Journal of Computational Physics* (2008), Oktober, Nr. 227, S. 3058–3088
- [36] GEISER, J. ; ELBIOMY, M.: *Splitting Method of Convection-Diffusion Methods with Disentanglement methods*. Humboldt-Universität zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät II, Institut für Mathematik, 2011. <http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.18452/2819>. <http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.18452/2819>
- [37] GERLINGER, Peter: *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 2005. – ISBN 978–3540233374
- [38] GHASSEMI, H. ; BAEK, S. W. ; KHAN, Q. S.: Experimental study on binary droplet evaporation at elevated pressures and temperatures. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Januar, S. 1031–1053. <http://dx.doi.org/10.1080/00102200500296697>. – DOI 10.1080/00102200500296697. – ISSN 0010–2202
- [39] GHASSEMI, H. ; BAEK, S. W. ; KHAN, Q. S.: Experimental study on evaporation of kerosene droplets at elevated pressures and temperatures. In: *Combustion Science and Technology* 178 (2006), Januar, S. 1669–1684. <http://dx.doi.org/10.1080/00102200600582392>. – DOI 10.1080/00102200600582392. – ISSN 0010–2202
- [40] GICQUEL, Olivier ; DARABIHA, Nasser ; THÉVENIN, Dominique: Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), Nr. 2, S. 1901–1908. [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(00\)80594-9](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(00)80594-9). – DOI 10.1016/S0082–0784(00)80594–9
- [41] GODSAVE, G. A. E.: Studies of the combustion of drops in a fuel spray: The burning of single drops of fuel. In: *Proceedings of the Fourth Symposium (International) on Combustion*. Baltimore : Combustion Institute, 1953, S. 818–830
- [42] GOGOS, G. ; SOH, S. ; POPE, D. N.: Effects of gravity and ambient pressure on liquid fuel droplet evaporation. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 46 (2004), S. 283–296
- [43] GOODMAN, F. O. ; WACHMAN, H. Y.: Formula for Thermal Accommodation Coefficients / M.I.T. Fluid Dynamics Research Laboratory. 1966. – Forschungsbericht
- [44] GOPIREDDY, S. R. ; HUMZA, R. M. ; GUTHEIL, E.: Numerical Simulation of an Evaporating Spray Using Direct Quadrature Method of Moments. In: *European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Estoril, September 2011
- [45] GORDON, Roy: Error Bounds in Equilibrium Statistical Mechanics. 9 (1968), 05, S. 655
-

-
- [46] GOUESBET, G. ; A., Berlemont ; PICART, A.: On the Tchen's theory of discrete particles dispersion: Can dense discrete particles disperse faster than fluid particles? In: *Letters in Heat and Mass Transfer* 9 (1982), Nr. 5, S. 407–419
- [47] GOUNDER, James D.: *An experimental investigation of non-reacting and reacting spray jets*, School of aerospace, mechanical and mechatronic engineering, Diss., 2009
- [48] GROLL, R.: *Numerische Modellierung der Verdunstung turbulenter Zwei-Phasen-Strömungen mittels eines Euler/Euler-Verfahrens*. Germany, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2002
- [49] GUMPRICH, W. ; SACOMANO FILHO, F.L. ; SADIKI, A. ; CHRIGUI, M.: Simulation of Evaporating Polydisperse Sprays using the Direct Quadrature based Sectional Method of Moments and a Realistic Evaporation Model. In: *International Conference on Multiphase Flow*. Jeju, May 2013
- [50] GUMPRICH, W. ; SADIKI, A.: Assessment of the Direct Quadrature based Sectional Method of Moments for the Simulation of Evaporating Polydisperse Sprays. In: *Proc. 8th ICMF*, Jeju, Korea, 2013
- [51] GUMPRICH, W. ; SYNEK, B. ; SADIKI, A.: Assessment of the Direct Quadrature-based Sectional Method of Moments for the simulation of evaporating polydisperse sprays. In: *Atomization and Sprays* 26 (2016), Nr. 2, S. 163–186. – ISSN 1044–5110
- [52] GUMPRICH, Werner: *Development of an Advanced Hybrid Model Based on the Direct Quadrature Method of Moments and Validation in Complex Polydisperse Sprays*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2013
- [53] GUMPRICH, Werner ; SADIKI, Amsini: Numerical Study of Dense Turbulent Sprays using a Coupling of the Direct Quadrature Method of Moments with an Eulerian Multi-Size Moment Model. In: *Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Heidelberg, September 2012
- [54] HARSTAD, Kenneth ; BELLAN, Josette: Analysis of the convective evaporation of nondilute clusters of drops. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 30 (1987), Nr. 1, S. 125–136
- [55] HARSTAD, Kenneth ; BELLAN, Josette: An all-pressure fluid drop model applied to a binary mixture: Heptan in nitrogen. In: *International Journal of Multiphase Flow* 26 (2000), S. 1675–1706
- [56] HARSTAD, Kenneth ; BELLAN, Josette: Evaluation of Commonly Used Assumptions for Isolated and Cluster Heptane Drops in Nitrogen at all pressures. In: *Combustion and Flame* 127 (2001), Januar, S. 1861–1879
- [57] HARSTAD, Kenneth ; BELLAN, Josette: Modeling evaporation of Jet A, JP-7, and RP-1 drops at 1 to 15 bars. In: *Combustion and Flame* 137 (2004), Januar, S. 163–177
- [58] HERRMANN, M.: A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. In: *Journal of Computational Physics* 227 (2008), Nr. 4, 2674–2706. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.11.002>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.11.002>. – ISSN 0021–9991
- [59] HERRMANN, M.: In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 132 (2010), 6, Nr. 6. – ISSN 0742–4795
- [60] HOLLMANN, C. ; GUTHEIL, E.: Modeling of turbulent spray diffusion flames including detailed chemistry. In: *Symposium (International) on Combustion* 26 (1996), Nr. 1, S. 1731–1738. [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(96\)80398-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(96)80398-5). – DOI 10.1016/S0082–0784(96)80398–5
- [61] HUBBARD, G.L. ; DENNY, V.E. ; MILS, A.F.: Droplet evaporation: Effects of transients and variable properties. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 18 (1975), S. 1003–1008
-

- [62] JANICKA, J. ; SADIKI, A.: Large eddy simulation of turbulent combustion systems. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), Nr. 1, 537–547. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.279>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.279>. – ISSN 1540–7489
- [63] JANICKA, Johannes (Hrsg.) ; SADIKI, Amsini (Hrsg.) ; SCHÄFER, Michael (Hrsg.) ; HEEGER, Christof (Hrsg.): *Flow and Combustion in Advanced Gas Turbine Combustors*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 2013. – ISBN 978–94–007–5320–4
- [64] JOOS, Franz: *Technische Verbrennung: Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodellierung, Emissionen*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 2006. – ISBN 978–3–540–34333–2
- [65] KADAVELIL, Jean: *Numerische Beschreibung reaktiver Zweiphasenströmungen für technische Anwendungen*. Aachen, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2017. <http://tubiblio.ulb.tu-darmstadt.de/85783/>
- [66] KAH, D.: *Prise en compte des aspects polydispersés pour la modélisation d'un jet de carburant dans les moteurs à combustion interne*. France, École Centrale Paris, Diss., 2010
- [67] KAH, D. ; EMRE, O. ; TRAN, Q. H. ; CHAISEMARTIN, S. de ; JAY, S. ; LAURENT, F. ; MASSOT, M.: High order moment method for polydisperse evaporating sprays with mesh movement: application to internal combustion engines. In: *International Journal of Multiphase Flow* (2015), S. 1–47
- [68] KAH, D. ; LAURENT, F. ; MASSOT, M. ; JAY, S.: A high order moment method simulating evaporation and advection of a polydisperse liquid spray. In: *Journal of Computational Physics* 2 (2012), Nr. 231, S. 394–422. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cp.2011.08.032>. – DOI 10.1016/j.cp.2011.08.032
- [69] KARYPIS, G. ; SCHLOEGEL, K. ; KUMAR, V.: *ParMETIS – Parallel Grap Paretitioning and Sparse Matrix Ordering Library Version 3.1.1*. Minneapolis, MN, 2008
- [70] KEIZER, Joel: *Statistical Thermodynamics of Nonequilibrium Processes*. 1. Auflage. New York : Springer, 1987. – ISBN 978–1–4612–6998–4
- [71] KETELHEUN, A. ; OLBRICHT, C. ; HAHN, F. ; JANICKA, J.: Premixed Generated Manifolds for the Computation of Technical Combustion Systems. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2009: Power for Land, Sea and Air*. Orlando, Florida, USA, 2009
- [72] KLAPDOR, Eva Verena: *Simulation of Combustor-Turbine Interaction in a Jet Engine*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2010
- [73] KLENKE, T.: *Hybride numerische Simulation von Verbrennungslärm und thermoakustischen Instabilitäten in technischen Verbrennungssystemen*. Germany, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2017
- [74] KOLAITIS, D. I. ; FOUNTI, M. A.: A comparative study of numerical models for Eulerian-Lagrangian simulations of turbulent evaporating sprays. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 27 (2006), S. 424–435
- [75] KÜHNE, Jens: *Analysis of Combustion LES using an Eulerian Monte Carlo PDF Method*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2011
- [76] LAURENT, F.: Numerical analysis of eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. In: *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 40 (2006), Nr. 3, S. 431–468
- [77] LAURENT, F. ; MASSOT, M. ; VILLEDIEU, P.: Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. In: *Journal of Computational Physics* (2004), Nr. 194, S. 505–543

-
- [78] LEVEQUE, R. J.: *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 2002
- [79] MARCHISIO, D. L. ; FOX, R. O.: Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. In: *Aerosol Science* (2005), Nr. 36, S. 43–73
- [80] MARTIN, Helmut (Hrsg.): *Numerische Strömungssimulation in der Hydrodynamik*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 2011. – ISBN 978-3-642-17208-3
- [81] MASHAYEK, Farzad: Droplet-turbulence interactions in low-Mach-number homogenous shear two-phase flows. In: *Journal of Fluid Mechanics* 367 (1998), S. 163–203
- [82] MASSOT, Marc ; LAURENT, Frédérique ; KAH, Damien ; DE CHAISEMARTIN, Stéphane: A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays. In: *SIAM Journal for Applied Mathematics* 70 (2010), Nr. 8, S. 3203–3234. <http://dx.doi.org/10.1137/080740027>. – DOI 10.1137/080740027
- [83] MATLOSZ, R. L. ; LEIPZIGER, S. ; TORDA, T. P.: Investigation of liquid drop evaporation in a high temperature and high pressure environment. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (1972), S. 831–852
- [84] MCGRAW, R.: Descriptions of aerosoldynamics by the quadrature. In: *Aerosol Science and Technology* 27 (1997), Nr. 2, S. 255–265
- [85] MEAD, L. R. ; PAPANICOLAOU, N.: Maximum entropy in the problems of moments. In: *Journal of Mathematical Physics* 25 (1984), S. 2404–2417
- [86] MÉNARD, T. ; TANGUY, S. ; BERLEMONT, A.: Coupling level set/VOF/ghost fluid methods: Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet. In: *International Journal of Multiphase Flow* 33 (2007), Nr. 5, 510–524. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2006.11.001>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2006.11.001>. – ISSN 0301–9322
- [87] MILLER, R. S. ; HARSTAD, K. ; BELLAN, J.: Evaluation of equilibrium an non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. In: *International Journal of Multiphase Flow* 24 (1998), Mai, S. 1025–1055. – ISSN 0009–2509
- [88] MORIN, C. ; CHAUVEAU, C. ; GÖKALP, I.: Droplet vaporisation characteristics of vegetable oil derived biofuels at high temperatures. In: *Exp. Thermal Fluid Science* 21 (2000), S. 41–50
- [89] NOMURA, H. ; IZAWA, K. ; UJIE, Y. ; SATO, J. ; MARUTANI, Y. ; KONO, M. ; KAWASAKI, H.: An experimental study on flame propagation in lean fuel droplet-vapor-air mixtures by using microgravity conditions. In: *Symposium (International) on Combustion* 27 (1998), Nr. 2, 2667–2674. [http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(98\)80122-7](http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0082-0784(98)80122-7). – DOI [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(98\)80122-7](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(98)80122-7). – ISSN 0082–0784
- [90] NOMURA, H. ; UJIE, Y. ; RATH, H. J. ; SATO, J. ; KONO, M.: Experimental study an high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions. In: *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1996, S. 1267–1273
- [91] OESTERLÉ, B. ; PETIJEAN, A.: Simulation of particle-to-particle interactions in gas-solid flows. In: *International Journal of Multiphase Flow* (1993), Nr. 19, S. 199–211
- [92] OIJEN, J. A. van ; DONINI, A. ; BASTIAANS, R. J. M. ; THIJE BOONKKAMP, J. H. M. ten ; GOEY, L. P. H. de: State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 57 (2016), Nr. Supplement C,
-

- 30–74. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.pecs.2016.07.001>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2016.07.001>. – ISSN 0360–1285
- [93] OIJEN, J. A. van ; GOEY, L. P. H. de: Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds. In: *Combustion Science and Technology* 161 (2000), Nr. 1, 113–137. <http://dx.doi.org/10.1080/00102200008935814>. – DOI 10.1080/00102200008935814
- [94] OSHER, S. ; FEDKIW, R.: *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. New York : Springer-Verlag, 2003. – ISBN 978–0–387–22746–7
- [95] PARAG, S. ; RAGHAVAN, V.: Experimental investigations of burning rates of pure ethanol and ethanol blended fuels. In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 997–1005
- [96] POINSOT, T. ; VEYNANTE, D.: *Theoretical and Numerical Combustion*. Philadelphia : R. T. Edwards Inc., 2001. – ISBN 1–930217–05–6
- [97] POINSOT, T. ; VEYNANTE, D.: *Theoretical and Numerical Combustion*. Philadelphia : R. T. Edwards Inc., 2001. – ISBN 1–930217–05–6
- [98] POPE, S. B.: *Turbulent Flows*. Cambridge : Cambridge University Press, 2000. – ISBN 0–521–59125–2
- [99] PORUBA, C.: *Turbulente Flammenausbreitung in Wasserstoff-Luft-Gemischen*. Germany, Technische Universität München, Diss., 2011
- [100] RADER, D. J. ; TROTT, W. M. ; TORCZYNSKI, J. R. ; CASTANEDA, J. N. ; GRASSER, T. W.: Measurements of Thermal Accommodation Coefficients / Sandia National Laboratories. 2005. – Forschungsbericht
- [101] RAMAN, V. ; PITSCH, H. ; FOX, R. O.: Eulerian transported probability density function sub-filter model for large-eddy simulations of turbulent combustion. In: *Combustion Theory and Modelling* 10 (2006), Nr. 3, S. 439–458
- [102] RANZ, W. E. ; MARSHALL, W. R.: Evaporation from drops - part 1. In: *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), S. 141–146
- [103] RANZ, W. E. ; MARSHALL, W. R.: Evaporation from drops - part 2. In: *Chemical Engineering Progress* 48 (1952), S. 173–180
- [104] REVEILLON, J. ; VERVISCH, L.: Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. In: *Journal of Fluid Mechanics* 537 (2005), S. 317–347. <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112005005227>. – DOI 10.1017/S0022112005005227
- [105] SACOMANO FILHO, F. L.: *Novel approach toward the consistent simulation of turbulent spray flames using tabulated chemistry*. Aachen, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2017. <http://tubiblio.ulb.tu-darmstadt.de/88246/>
- [106] SADIKI, A. ; CHRIGUI, M. ; JANICKA, J. ; MANESHKARIMI, M. R.: Modeling and Simulation of Effects of Turbulence on Vaporization, Mixing and Combustion of Liquid-Fuel Sprays. In: *Flow, Turbulence and Combustion* (2005), Nr. 75, S. 105–130
- [107] SATO, J.: Studies on Droplet Evaporation und Combustion in High Pressures. In: *31st Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, American Institute of Aeronautics und Astronautics, 1993, S. 1–10
- [108] SAUER, Benjamin: *Direct numerical simulation of the primary breakup of aircraft engine related two-phase flows*. München, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2014. <http://tubiblio.ulb.tu-darmstadt.de/65770/>. – Zugl.: Darmstadt, Techn. Univ., Diss. 2014
- [109] SAZHIN, S. ; KRISTYADI, T. ; ABDELGHAFFAR, W. A. ; HEIKAL, M. R.: Models for fuel droplet heating and evaporation: Comparative analysis. In: *Fuel* 85 (2006), S. 1613–1630

-
- [110] SAZHIN, Sergei S.: Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 32 (2006), S. 162–205
- [111] SAZHIN, S. S. ; ABDELGAFFAR, W. A. ; KRUTITSKII, P. A. ; SAZHINA, E. M. ; HEIKAL, M. R.: New approaches to numerical modelling of droplet transient heating and evaporation. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 48 (2005), S. 4215–4228
- [112] SCHNEIDER, Lukas: *A Concise Moment Method for unsteady Polydisperse Sprays*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2009
- [113] SCHWARZE, Rüdiger (Hrsg.): *CFD-Modellierung; Grundlagen und Anwendung bei Strömungsprozessen*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 2013. – ISBN 978–3–642–24378–3
- [114] SCHÄFER, Michael: *Numerik im Maschinenbau*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 1999. – ISBN 978–3–7091–1181–9
- [115] SHASHANK ; KNUDSEN, E. ; PITSCH, H.: Spray evaporation model sensitivities. In: *Annual Research Briefs 2011*, Center for Turbulence Research, 2011, S. 213–224
- [116] SHIH, T.-H. ; LIOU, W.W. ; SHABBAR, A. ; YANG, Z. ; ZHU, J.: A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows. In: *Computers and Fluids* 24 (1995), Nr. 3, S. 227–238. [http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)00032-T](http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T). – DOI [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)00032-T](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T)
- [117] SIBRA, A. ; DUPAYS, J. ; MURRONE, A. ; LAURENT, F. ; MASSOT, M.: Simulation of reactive polydisperse sprays strongly coupled to unsteady flows in solid rocket motors: Efficient strategy using Eulerian Multi-Fluid methods, 2014
- [118] SIRIGNANO, W.A. (Hrsg.): *Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays*. 1. Auflage. Cambridge : Cambridge University Press, 1999. – ISBN 0–521–63036–3
- [119] SIRIGNANO, W.A. (Hrsg.): *Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays*. 2. Auflage. Cambridge : Cambridge University Press, 2010. – ISBN 978–0–511–67564–5
- [120] SOMERS, B.: *The Simulation of Flat Flames with Detailed and Reduced Chemical Models*. Nederland, Technische Universiteit Eindhoven, Diss., 1994
- [121] SPALDING, D.B.: Experiments on the burning and extinction of liquid fuel spheres. In: *Fuel* 32 (1953), S. 169–185
- [122] SPALDING, D.B.: Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. In: *Symposium (International) on Combustion* 13 (1971), Nr. 1, 649–657. [http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(71\)80067-X](http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(71)80067-X). – DOI [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(71\)80067-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(71)80067-X). – ISSN 0082–0784. – Thirteenth symposium (International) on Combustion
- [123] SPURK, Joseph H. (Hrsg.) ; AKSEL, Nuri (Hrsg.): *Strömungslehre; Einführung in die Theorie der Strömungen*. 6. Auflage. Heidelberg : Springer, 2006. – ISBN 978–3–540–26293–0
- [124] SPYROU, Nikolaos: *Detaillierte numerische Simulationen von flugtriebwerksrelevanten Zweiphasenströmungen*, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2010
- [125] STAUFER, M.: *Large Eddy Simulation of Premixed and Partially Premixed Flames*. Germany, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2009
- [126] STEPHAN, Peter (Hrsg.) ; SCHABER, Karlheinz (Hrsg.) ; STEPHAN, Karl (Hrsg.) ; MAYINGER, Franz (Hrsg.): *Thermodynamik; Grundlagen und technische Anwendungen Band 1: Einstoffsysteme*. 17. Auflage. Heidelberg : Springer, 2007. – ISBN 978–3–540–70813–1
-

-
- [127] STEPHAN, Peter (Hrsg.) ; SCHABER, Karlheinz (Hrsg.) ; STEPHAN, Karl (Hrsg.) ; MAYINGER, Franz (Hrsg.): *Thermodynamik; Grundlagen und technische Anwendungen Band 2: Mehrstoffsysteme und chemische Reaktionen*. 15. Auflage. Heidelberg : Springer, 2010. – ISBN 978-3-540-36855-7
- [128] STRANG, G.: On the construction and comparison of difference schemes. In: *SIAM Journal* 5 (1968), S. 506–517
- [129] STROTOS, George ; GAVAISES, Manollis ; THEODORAKAKOS, Andreas ; BERGELES, George: Numerical investigation of the evaporation of two-component droplets. In: *Fuel* 90 (2011), S. 1492–1507
- [130] SYNEK, B. ; GUMPRICH, W. ; SADIKI, A.: Direct Quadrature-based Sectional Method of Moments coupled to realistic evaporation models. In: *14th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*. Halle (Saale), Germany, 2015
- [131] SYNEK, B. ; GUMPRICH, W. ; SADIKI, A.: Evaluation of evaporation models using the Direct Quadrature-based Sectional Method of Moments. In: *Proceedings of the Eighth International Symposium On Turbulence, Heat and Mass Transfer*. Sarajevo, Bosnia and Herzegovina, 2015
- [132] SYRED, Nick (Hrsg.) ; KHALATOV, Artem (Hrsg.): *Advanced Combustion and Aerothermal Technologies: Environmental Protection and Pollution Reductions*. 1. Auflage. Heidelberg : Springer, 2006. – ISBN 978-1-4020-6515-6
- [133] TECHNISCHE UNIVERSITEIT EINDHOVEN: *Chem1D*. <https://www.tue.nl/en/university/departments/mechanical-engineering/research/research-groups/multiphase-and-reactive-flows/our-expertise/chem1d/>, . – Zugriff Juli 2017
- [134] TECHNOLOGIE, Bundesministerium für Wirtschaft u.: *Energiedaten: Nationale und Internationale Entwicklung / Referat III C 3*. 2012. – Zahlen und Fakten
- [135] TÖRNING, W. ; SPELLUCCI, P.: *Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker*. 2. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 1989
- [136] UK, BP: *BP Energy Outlook 2016 edition*. <https://www.bp.com/content/dam/bp/pdf/energy-economics/energy-outlook-2016/bp-energy-outlook-2016.pdf>, 2016. – Zugriff September 2017
- [137] VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE ; VDI-GESELLSCHAFT VERFAHRENSTECHNIK ; CHEMIEINGENIEURWESEN (GVC): *VDI-Wärmeatlas*. 10. Auflage. Heidelberg : Springer, 2006. – ISBN 978-3-540-25504-8
- [138] VERSTEEG, H. K. (Hrsg.) ; MALALASEKERA, W. (Hrsg.): *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. 1. Auflage. Harlow : Pearson Education, 1995. – ISBN 0-582-21884-5
- [139] VIÉ, A. ; LAURENT, F. ; MASSOT, M.: Size-velocity correlations in hybrid high order moment/multi-fluid methods for polydisperse evaporating sprays: Modeling and numerical issues. In: *Journal of Computational Physics* 237 (2013), Nr. Supplement C, 177–210. <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.11.043>. – DOI <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.11.043>. – ISSN 0021-9991
- [140] VIKAS, V. ; WANG, Z. J. ; PASSALACQUA, A. ; FOX, R. O.: A fully coupled fluid-particle flow solver using quadrature-based moment method with high-order realizable schemes on unstructured grids. In: *Proceedings of 7th International Conference on Multiphase Flow (ICMF 2010)*. Tampa, FL, USA, 2010
- [141] VILLIERS, E. de ; GOSMAN, A. D. ; WELLER, H. G.: Large Eddy Simulation of Primary Diesel Spray Atomization. In: *SAE Technical Paper*, SAE International, March 2004
- [142] WARANTZ, J. (Hrsg.) ; MAAS, U. (Hrsg.) ; DIBBLE, R. W. (Hrsg.): *Verbrennung: Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. 3. Auflage. Heidelberg : Springer, 2001. – ISBN 978-3-642-62658-6

-
- [143] WILLIAMS, F.A.: Spray Combustion and Atomization. In: *The Physics of Fluids* 1 (1958), November, Nr. 6, S. 541–545
- [144] WILLIAMS, F.A. (: Recent Advances in Theoretical Descriptions of Turbulent Diffusion Flames. In: *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows* (1975)
- [145] WONG, Shwin-Chung ; LIN, Ar-Cheng: Internal temperature distributions of droplets vaporizing in high temperature convective flows. In: *Journal of Fluid Mechanics* 237 (1992), S. 671–687
- [146] YANG, Jeng-Renn ; WONG, Shwin-Chung: On the discrepancies between theoretical and experimental results for microgravity droplet evaporation. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 44 (2001), S. 4433–4443
- [147] YANG, Jeng-Renn ; WONG, Shwin-Chung: An experimental and theoretical study of the effects of heat conduction through the support fiber on the evaporation of a droplet in a weakly convective flow. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45 (2002), S. 4589–4598
- [148] YUEN, M. C. ; CHEN, L. W.: On drag of evaporating liquid droplets. In: *Combustion Science Technology* 14 (1976), S. 147–154
- [149] ZHU, G. S. ; AGGARWAL, S.K.: Transient supercritical droplet evaporation with emphasis on the effects of equation of state. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 43 (2000), S. 1157–1171